UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

"EL NÚMERO DE PÉCLET Y SU SIGNIFICACIÓN EN LA MODELACIÓN DE TRANSPORTE DIFUSIVO DE CONTAMINANTES"

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

M A T E M Á T I C O

P R E S E N T A :

AGUSTÍN ALBERTO ROSAS MEDINA

DIRECTOR DE TESIS: DR. ISMAEL HERRERA REVILLA

FACULTAD DE CIENCIAS
UNAM

2005

M349350

Universidad Nacional Autónoma de México
UNAM
Biblioteca Central
Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

VNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MEXICO

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.
NOMBRE: ROSAS MEDINA AGUSTIN ALBERTO
FECHA: 26 de octubre de 2005
FIRMA:

ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito: "El Número de Péclet y su Significación en la Modelación de Transporte Difusivo de Contaminantes"

realizado por Agustín Alberto Rosas Medina

con número de cuenta 09958498-0 , pasante de la carrera de: Matemáticas .

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis Propietario	Dr. Ismael Herrera Revilla
Propietario	Dr. Martín Alberto Díaz Viera
Propietario	Dr. Manuel Jesús Falconi Magaña
Suplente	Dra. María de Lourdes Esteva Peralta
Suplente	Mat. Antonio Carrillo Ledesma

Consejo Departamental de Matemáticas

M. en C. Alejandro Bravo Mojica

Dedicado a

A mis padres:

Elvia y Juan, quienes me dieron la vida y debo mi formación y que siempre confiaron en mi,

A mis hermanos:

Rosa, Sele, Juanito, Chucho, Miri, Luis y por último David, por su cariño y apoyo,

A mi tío:

Vicente, quien fue el primer matemático que conocí, gracias por su apoyo incondicional en mi formación.

A todos aquellos que equivocadamente piensan que un matemático es el de las cuentas.

Índice

1. Introducción 6

2. Formulación de los Modelos de Sistemas Continuos 10
   2.1. Propiedades Intensivas y Extensivas 11
      2.1.1. Propiedades Intensivas 11
      2.1.2. Propiedades Extensivas 11
   2.2. Balance de Propiedades Extensivas e Intensivas 12
      2.2.1. Condiciones de Balance Local 13

3. Modelación del Transporte en Fluidos Libres 16
   3.1. Transporte de Solutos 17
      3.1.1. Procesos del Transporte 18
   3.2. Modelos Completos 21
      3.2.1. Condiciones Iniciales y de Frontera 21
   3.3. Planteamiento del Problema de Transporte a Estudiar 22

4. Métodos de Solución 24
   4.1. Solución Analítica 24
      4.1.1. Análisis de la Solución 25
   4.2. Planteamiento de los Métodos a Considerar en la Solución Numérica 28
      4.2.1. Diferencias Finitas 28
      4.2.2. Elemento Finito 31

5. Número de Péclet 35
   5.1. Número de Péclet Global y Local 35
   5.2. Importancia del Número de Péclet 36

6. Comportamiento de los Métodos Numéricos 38
   6.1. Elemento Finito 38
      6.1.1. Análisis de la Solución Considerando el Número de Péclet 40
   6.2. Diferencias Finitas 41
      6.2.1. Esquema Upwind 42
      6.2.2. Esquema Scharfetter-Gummel 45
      6.2.3. Difusión Artificial 46

7. Elemento Finito Estabilizado 51
7.1. Análisis de la Difusión Artificial 51
7.2. Convergencia de la Solución Numérica 55

8. Comentarios Finales 64

9. Apéndice A 66
9.1. Programa 1 66
9.2. Programa 2 73
9.3. Programa 3 79

10. Apéndice B 83

11.Bibliografía 85

Prefacio

Un modelo ampliamente utilizado para el **transporte difusivo de contaminantes** se obtiene haciendo uso de la ecuación diferencial parcial de Advección-Difusión, el cual es un es un modelo de gran importancia para el hombre, por ello, en el presente trabajo se estudia ésta.

En la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales para el caso de Advección-Difusión surgen los problemas cuando hay advección dominante, estos problemas se manifiestan como oscilaciones alrededor de la solución exacta. En este trabajo la significancia del **Número de Péclet** se hace notar al comparar la solución exacta y la numérica del modelo, ya que es un parámetro eficaz en la solución numérica. La solución numérica se obiene utilizando los métodos de Diferencias Finitas (**FD**) y Elemento Finito (**FEM**) [6]. Para eliminar los problemas de este fenómeno de transporte, se utilizan las herramientas de Diferencias Finitas, **upwind** y **Scharfetter-Gummel**, y se concluye con **Elemento Finito estabilizado** con el cual se hace uso de estos dos métodos a fin de encontrar la mejor solución numérica al problema.

La estructura del presente trabajo está dada de la siguiente manera:

En el capítulo 1 está dada la **Introducción**, en la cual se muestra la importancia de los modelos matemáticos en sistemas de interés para el hombre, así también se plantea el modelo a trabajar en esta tesis, y se da referencia de algunos trabajos especializados en el mismo modelo a estudiar.

En el capítulo 2, **La Formulación de los Modelos de Sistemas Continuos**, se presenta de manera general las bases para los modelos de sistemas continuos.

En el capítulo 3, **Modelación del Transporte en Fluidos Libres**, aquí se presenta la ecuación diferencial parcial que modela el transporte de solutos (contaminates), en fluidos libres, en base a esta ecuación se plantea el modelo que se analizará en esta tesis.

En el capítulo 4, **Métodos de Solución**, se plantea la solución analítica de nuestro problema y se muestra la solución numérica por los métodos FD y FEM.

En el capítulo 5, **Número de Péclet**, se da la definición del Número de Péclet y se enuncia lo significante que es en la solución numérica del problema.

En el capítulo 6, **Comportamiento de los Métodos Numéricos**, se muestran los problemas que ocurren en la solución numérica hallada utilizando las ecuaciones *lineales* en *diferencias* para los dos métodos FD y FEM en relación con el Número de Péclet. Como primera instancia, se presenta el método *upwind* para evitar los problemas hallados con FD y FEM, y por último se hace uso del método Scharfetter-Gummel (SG), con el cual la solución numérica es nodalmente exacta.

En el capítulo 7, **Elemento Finito Estabilizado**, se emplea la técnica usada con FD y se demuestra la covergencia para los métodos upwind y Scharfetter-Gummel.

Además de los capítulos descritos, se concluye con algunos comentarios finales que están en el capítulo 8. De igual forma se integran dos apéndices, en el apéndice A está dado el código de los programas utilizando el método de diferencias finitas, en el B se dan resultados matemáticos usados en la demostración que viene en el capítulo 7.

Agradecimientos

En primer lugar quiero expresar mi gratitud a mi director de tesis, el Dr. Ismael Herrera Revilla por su sabiduria compartida, por enseñarme que los principios básicos para los modelos matemáticos son: la claridad, la generalidad y la sencillez, por todo el apoyo brindado y que gracias a él fue posible este trabajo. Al Instituto de Geofísica de la UNAM, en el cual tuve un espacio fisico y la beca otorgada para el desarrollo de esta tesis. Un agradecimento especial a mis sinodales, Martín Diaz, Manuel Falconi, Lourdes Estava y Antonio Carrillo por sus amables asesorias y brillantes consejos que fueron fundamentales para la conclusión de la presente tesis. A la Facultad de Ciencias de la UNAM por permitirme ser parte de ella.

Tambien quiero que aqui figuren los nombres de mis amigos y compañeros, Adrian Hernández, Ambrosio Ortiz, Alfredo Muñoz, Alfredo Olvera , Alicia Ramirez, Angeles Vasquez, Arturo Avalos, Arturo Velasquez, Flor Angeli, Francisco Pliego, Guadalupe García, Horacio Medina, Janet Mancio, José Rodriguez, Israel Sánchez, Lizeth Herrera, Miguel Escutia, Nabor Trejo, Nadia Arteaga, Nora Perez, Paola Mejia, Raul Vieyra, Wendy Mejía. A todas estas personas quiero agradecerles por estar presentes en una etapa muy importante de mi vida, pero sobre todo por su amistad. No puedo dejar de mencionar a mis primos, Arturo y Eduardo por todo este tiempo de convivir bajo el mismo techo.

A. Alberto Rosas Medina

1. Introducción

La necesidad de entender su entorno y anticiparse a los acontecimientos, tiene raíces muy profundas en el ser humano. El hombre siempre ha tratado de entender a la naturaleza y de predecirla ya que de ella dependía su supervivencia. Con el paso del tiempo, el medio más efectivo para predecir el comportamiento de la naturaleza es el método científico. En la actualidad, cuando deseamos predecir el comportamiento de un sistema, los conocimientos científicos y tecnológicos se integran en modelos matemáticos, algunos de los cuales se convierten en programas de cómputo que son ejecutados por computadoras.

En términos generales, los sistemas que son importantes para los seres humanos pertenecen al ámbito físico, biológico y social. En este trabajo nuestra atención se centra en un sistema que pertenece al ámbito físico. Para la predicción científica se adopta un método muy general: *la modelación.* La cual consiste en utilizar modelos de los sistemas de interés. Aquí, se entiende por modelo a un sustituto del sistema original, de cuyo comportamiento es posible derivar el del sistema de interés. Es importante notar que aunque la mayor parte de sistemas en ciencias e ingeniería son sistemas físicos, no son susceptibles de ser modelados por la mecánica cuántica. Esto es por que dichos sistemas pertenecen a la *física macroscópica*, mientras la Mecánica Cuántica proporciona una metodología apropiada para el estudio de la *física microscópica.*

Los fundamentos de la *física macroscópica* los proporciona la "*Teoría de los medios continuos*". En este trabajo y con base en esta teoría, en el capítulo 2 se introduce la formulación de los modelos matemáticos de los sistemas continuos. La base para la construcción de los modelos, tiene su fundamento en la teoría general de los sistemas continuos y está constituida por ecuaciones de balance que son aplicables a cualquier sistema continuo de ecuaciones independiente de su naturaleza. A partir de la ecuación de balance

global se derivan las ecuaciones de balance local, las cuales constituyen por si mismas los modelos básicos de los sistemas continuos.

Consideraremos como sistema a tratar el fenómeno de transporte. El fenómeno de transporte tiene lugar cuando una sustancia está disuelta en otra, por ejemplo, como cuando una sal o un contaminante están disueltas en agua. Entonces se le llama soluto a la sustancia disuelta y solvente al medio en que se encuentra aquella. Al movimiento de la sustancia disuelta se le llama transporte. Cuando se estudia el transporte, es habitual llamar a la masa del soluto por unidad de volumen del solvente, concentración. En esa clase de estudios la concentración es función tanto de la posición como del tiempo y se denotará por $c(\underline{x}, t)$.

Cuando la sustancia está disuelta en el medio, ella es arrastrada por el movimiento de éste, es decir; si consideramos que el fluido está en movimiento entonces tendrá cierta velocidad $\underline{v}(\underline{x}, t) \neq 0$, la cual es la velocidad a la que pasa la partícula $\underline{X}$ por la posición $\underline{x}$ al tiempo t, que es de gran interés para poder formular el modelo de transporte. Existen casos en los cuales el fluido está en reposo, en este caso la velocidad de las partículas es cero; es decir, $\underline{v}(\underline{x}, t) = 0$. Cabe mencionar que existen 2 tipos de transporte, transporte en fluidos libres y transporte en medios porosos. En este trabajo se considera sólo el fenómeno de transporte en fluidos libres.

Al considerar este fenómeno como sistema, se prosigue a plantear de manera general su modelo matemático, para ello hacemos uso de las condiciones de balance local y pedimos que nuestro modelo sea un modelo completo, este tema que será visto con mayor detalle en el capítulo 3. Como se mencionó anteriormente cuando se estudia el transporte se considera a la concentración del soluto. Existen procesos que tienen lugar en el fenómeno de transporte de solutos, es decir; procesos que intervienen de manera directa en el aumento o disminución de la concentración del soluto del sistema en estudio (advección,

difusión, procesos no conservativos). Dichos procesos se plantean en la sección (3.1.1).

Una vez que se ha planteado el modelo del fenómeno de transporte e identificado los procesos que intervienen de manera directa en él, lo más lógico es pensar en hallar su solución, ya sea de manera analítica y/o numérica. Este análisis será visto en el capítulo (4). El problema de transporte cuando la velocidad del fluido no es grande se resuelve numéricamente en forma satisfactoria casi por cualquier método. Sin embargo el problema de transporte dominado por advección tiene considerable dificultad. Para abordarlo se han desarrollado diversos métodos, entre los que destacan el *Stream-Upwind* de Hughes [10] y el *Eulerian Lagrangian Localized Adjoint Method* desarrollado por el grupo **ELLAM** formado por Celia, M. A. (Princenton), Ewing, R. E. (TAMU), Herrera, I. (UNAM) y Russell.T.F. (Colorado, Denver). Los artículos originales son [1] y [4]. Una descripción reciente del estado actual de estos desarrollos está en [8].

En este trabajo se estudian dos métodos numéricos para hallar la solución del problema de transporte difusivo de contaminantes (caso unidimensional), ellos son el Método de Elemento Finito (FEM) y el Método de Diferencias Finitas (FD). Estos métodos serán vistos en el capítulo 6. Con las ecuaciones *lineales* en *diferencias,* considerando el Número local de Péclet, se mostrará los problemas que se presentan en la solución numérica cuando se trata con velocidades elevadas. Algunas dificultades desaparecerán con Diferencias Finitas (FD), y en este trabajo mostraremos como la estabilidad de este método se relaciona con el número de Péclet. El *Número de Péclet* es un parámetro eficaz en la solución numérica de la ecuación de transporte además de medir la importancia relativa de la advección.

Una vez que desaparece la dificultad utilizando Diferencias Finitas (FD) empleamos la misma técnica con el Método de Elemento Finito tema que será visto en el capítulo 7. En el capítulo 8 se dan los comentarios finales de

este trabajo, en el cual se da solución al problema de Transporte de Solutos en Fluidos Libres mostrando la importancia del número de Péclet.

Para hallar la solución numérica se realizaron 3 programas de cómputo utilizando el Método de Diferencias Finitas. El programa 1 muestra los problemas de oscilaciones para valores del Número de Péclet mayores que uno; en el programa 2, se introduce una variante del Metodo de Diferencias Finitas con el cual se nota un efecto de eliminación de oscilaciones, y por último con el programa 3 se obtiene una solución la cual es nodalmente exacta y es una mejor aproximación a la solución analítica del problema. El paquete de cómputo utilizado para obtener la solución en la forma numérica fue *octave* el cual trabaja bajo ambiente Linux, (corre sin modificación alguna en MATLAB), el código de los programas está detallado en el apéndice A.

2. Formulación de los Modelos de Sistemas Continuos

Muchos sistemas de la Ingeniería y de las Ciencias Aplicadas, se estudian con la mecánica de los medios continuos, ver [12]. Entre los sistemas que requieren de la aplicación de la teoría del continuo para realizar la predicción de su comportamiento, están las estructuras, los suelos, los depósitos de recursos naturales, como el petróleo o el agua subterránea, la atmósfera, por mencionar algunas.

La hipótesis principal de la teoría de los sistemas continuos, es que *los cuerpos llenan todo el espacio que ocupan, y en cada punto del espacio físico hay una y sólo una partícula.* Así definimos como sistema continuo a un conjunto de partículas, de manera más general, tal conjunto es un subconjunto del espacio Euclidiano tridimensional. Un cuerpo es un subconjunto de partículas que en cualquier instante dado ocupa un dominio, (en el sentido matemático), del espacio físico; es decir del espacio Euclidiano tridimensional. Denotaremos por $B(t)$ a la región ocupada por el cuerpo $\mathcal{B}$, en el tiempo t. Sea $\underline{X} \in \mathcal{B}$, una partícula y $p(\underline{X}, t)$ el vector de la posición $\underline{x}$, que ocupa, en el espacio físico, dicha partícula en el instante t.

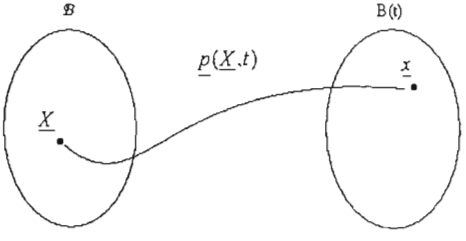

Figura 1: Representación del movimiento de partículas de un cuerpo $\mathcal{B}$, para un tiempo dado.

Dicho lo anterior, en este capítulo se plantea de manera general las bases necesarias para obtener los modelos de los sistemas continuos.

2.1. Propiedades Intensivas y Extensivas

De acuerdo a lo anterior, enunciaremos propiedades, las cuales son funciones de gran importancia para poder plantear de manera general los modelos de sistemas continuos. En nuestro caso para el modelo de transporte de solutos.

2.1.1. Propiedades Intensivas

Estudiaremos funciones definidas, para cada tiempo, en cada una de las partículas de un sistema continuo. A tales funciones se les llama *propiedades intensivas*. Las propiedades intensivas pueden ser funciones escalares o funciones vectoriales, la concentración de cierta sustancia al tiempo t, la velocidad, son ejemplos de funciones escalar y vectorial respectivamente, que dependen de la partícula $\underset{\sim}{X}$ y del tiempo t.

2.1.2. Propiedades Extensivas

A diferencia de lo anterior aquí consideramos funciones que a cada cuerpo, $\mathcal{B}$ de un sistema continuo y, a cada tiempo t le asocia un número real o un vector de $\mathbb{R}^3$. Algunos ejemplos son el volumen del fluido, masa de un soluto, etc. A una función de este tipo $E(\mathcal{B}, t)$, se le llama *propiedad extensiva* y se denota por

$$E(\mathcal{B}, t) = \int_{B(t)} \psi(\underset{\sim}{x}, t)\, d\underset{\sim}{x} \tag{2.1}$$

donde $\psi(\underset{\sim}{x}, t)$, es una *propiedad intensiva*; es decir, es una función definida en la posición $\underset{\sim}{x}$, de la partícula $\underset{\sim}{X}$ al tiempo t. De lo anterior concluimos que se establece una relación biunívoca entre las *propiedades extensivas* y las *intensivas*.

2.2. Balance de Propiedades Extensivas e Intensivas

Los modelos matemáticos de los sistemas continuos están constituidos por balances de propiedades extensivas, por ejemplo: los modelos de transporte de solutos (los contaminantes transportados por corrientes superficiales o subterráneas, son un caso particular de estos procesos de transporte). Estos modelos se construyen haciendo el balance de la masa del soluto que hay en cualquier parte del espacio físico.

Para realizar tales balances es necesario, identificar las causas por las que las propiedades extensivas pueden cambiar, es decir, sabemos que una propiedad extensiva está definida en un cuerpo $\mathcal{B}$ para cada tiempo t, entonces las causas por las que puede cambiar, se debe solamente a dos motivos que son los siguientes:

I) Por producción en el interior del cuerpo.

II) Por importación (es decir, transporte) a través de la frontera.

Esto conduce a expresar el balance de masas, de manera general como

$$\frac{\mathrm{d}E(\mathcal{B},t)}{\mathrm{d}t} = \int_{B(t)} \mathrm{g}(\underline{x},t)dx + \int_{\partial B(t)} q(\underline{x},t)dx + \int_{\Sigma(t)} \mathrm{g}_{\Sigma}(x,t)dx \qquad (2.2)$$

donde $\mathrm{g}(\underline{x},t)$ es la generación en el interior del cuerpo, tal que el signo corresponde a la propiedad extensiva, por unidad de volumen por unidad de tiempo. En la ecuación (2.2) se ha tomado en cuenta la posibilidad de que haya producción concentrada en la superficie $\Sigma(t)$, la cual está dada por la última integral, donde $\mathrm{g}_{\Sigma}(x,t)$ es la producción por unidad de área. Por otra parte, $q(\underline{x},t)$ es lo que se importa, o transporta, hacia el interior del cuerpo $B(t)$,a través de la frontera, $\partial B(t)$, del cuerpo, o dicho de otra manera es el flujo de la propiedad extensiva a través de la frontera del cuerpo, por unidad de área por unidad de tiempo. En la ecuación (2.2) $q(\underline{x},t)$ puede ser expresado como

$$q(\underline{x},t) = \underline{\imath}(\underline{x},t) \cdot \underline{n}(\underline{x},t) \qquad (2.3)$$

en donde hemos utilizado la normal exterior a la frontera, $\partial B(t)$, y un campo vectorial para cada tiempo t, como $\underline{n}(\underline{x},t)$ y $\underline{\tau}(\underline{x},t)$ respectivamente. Sustituyendo la igualdad (2.3) en la ecuación (2.2) obtenemos

$$\frac{\mathrm{d}E(\mathcal{B},t)}{\mathrm{d}t} = \int_{B(t)} \mathrm{g}(\underline{x},t)dx + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x},t)\cdot\underline{n}(\underline{x},t)dx + \int_{\Sigma(t)} \mathrm{g}_{\Sigma}(x,t)dx \qquad (2.4)$$

la cual se le conoce con el nombre de **Ecuación de Balance Global.** ver [6]

2.2.1. Condiciones de Balance Local

Los modelos de los sistemas continuos, están constituidos por las Ecuaciones de Balance correspondientes a una colección de propiedades extensivas. Sin embargo, las propiedades extensivas no se utilizan directamente en la formulación del modelo, en su lugar se usan las propiedades intensivas asociadas a cada una de ellas, ya que como se mencionó, existe una relación biunívoca entre las propiedades *extensivas* e *intensivas*. Lo anterior es posible porque las Ecuaciones de Balance Global son equivalentes a las llamadas Condiciones de Balance Local, las cuales se expresan en términos de las propiedades intensivas correspondientes.

Las Condiciones de Balance Local son de dos clases: "Las Ecuaciones diferenciales de Balance Local" y las "Condiciones de Salto". Las primeras son ecuaciones diferenciales parciales, que se deben satisfacer en cada punto del espacio ocupado por el sistema continuo, las segundas son ecuaciones algebraicas que las discontinuidades deben satisfacer en donde ocurren; es decir en cada punto de Σ. Se entiende por "*discontinuidad de salto*", una en que el limite por ambos lados de $\Sigma(t)$ existe, pero son diferentes. Cabe mencionar aquí que el presente trabajo está enfocado solamente en modelos de sistemas donde no existen discontinuidades, es decir, $\mathrm{g}_{\Sigma}(x,t) = 0$.

Una vez establecidas las ecuaciones diferenciales e incorporada la información científica y tecnológica necesaria para completar el modelo, el problema

matemático de desarrollar el modelo y derivar sus predicciones se transforma en uno correspondiente a la Teoría de Ecuaciones Diferenciales Parciales y sus Métodos Numéricos.

Teorema 1 *Considere un sistema continuo, además se supone que $\psi(\underline{x}, t)$ es continua y con primera derivada continua en $B(t)$. Entonces, la "Ecuación de Balance Global"(2.4), se satisface para todo cuerpo $B(t)$ del sistema continuo, si y sólo si, se cumple las siguientes condiciones:*

i) La ecuación diferencial

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi) = \nabla \cdot \underline{\mathcal{I}} + g \tag{2.5}$$

vale en todo punto $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$, de la región ocupada por el sistema

ii) la ecuación

$$[\psi(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\mathcal{I}}] \cdot \underline{n} = g_\Sigma \tag{2.6}$$

vale para todo punto $\underline{x} \in \Sigma$.

La ecuación (2.5), se le llama "**Ecuación Diferencial de Balance Local**" y la ecuación (2.6), "**Condición de salto**" respectivamente, ver [5].

Los modelos más generales de los sistemas se refieren a situaciones dinámicas; es decir, aquéllas en que las propiedades intensivas cambian con el tiempo. Sin embargo, los estados estacionarios de los sistemas continuos son de gran interés. Al hablar de estado estacionario se entiende que las propiedades intensivas no cambian con respecto al tiempo. En este caso, $\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0$, de aquí que para los estados estacionarios la Ecuación Diferencial de Balance Local (2.5) se reduce a

$$\nabla \cdot (\underline{v}\psi) = \nabla \cdot \underline{\mathcal{I}} + g \tag{2.7}$$

que se satisface en cada punto $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$, de la región ocupada por el sistema.

Consideremos el caso en el cual tanto la velocidad $v(\underline{x}, t)$, de las partículas como el campo vectorial $\underline{\mathcal{I}}(\underline{x}, t)$, son distintos de cero, entonces la ecuación

(2.7) es conocida como la Ecuación de Advección-Difusión que es de gran importancia en el transporte de solutos, tema que será tratado con mayor detalle en capítulos posteriores. Los términos $\underline{v}(\underline{x}, t)$ y $\underline{\tau}(\underline{x}, t)$ son los responsables de la Advección y Difusión respectivamente.

3. Modelación del Transporte en Fluidos Libres

En el presente capítulo se plantea el modelo de transporte de solutos en fluidos libres, para ello utilizaremos la relación que existe entre la propiedad *extensiva* y la *intensiva*, y una vez ilustrada está relación hacemos uso del Teorema 1 para obtener de manera directa la ecuación que gobierna el transporte de solutos y expresar la correspondiente ecuación de salto considerando la continuidad del cuerpo. En la sección 3.1, se describen los procesos que intervienen en el transporte de solutos, se utiliza la "*ley de fick*" ya que es el modelo más sencillo y ampliamente utilizado para la difusión molecular en fluidos libres. De igual forma hacemos uso de la isotropía de las partículas para el planteamiento de la ecuación de transporte, y pedimos que nuestro modelo sea completo, esto será visto en la sección 3.2. Por último en la sección 3.3 se expresa el modelo para el caso unidimensional. El **Transporte Difusivo de Contaminates** es un caso particular del transporte en fluidos libres.

Al hablar de fluidos libres se supone que el fluido ocupa todo el espacio físico que lo contiene, los modelos que se utilizan para predecir el transporte de solutos se construye con base en una sola propiedad *extensiva: la masa del soluto*; es decir, $E(\mathcal{B},t) = M_s(t)$. La propiedad *intensiva* asociada a la masa del soluto es la *concentración del soluto*, $c(\underline{x},t)$, así la masa del soluto $M_s(t)$, está dada por la siguiente expresión

$$M_s(t) = \int_{B(t)} c(\underline{x},t)dx. \tag{3.1}$$

La concentración de un soluto se define como la masa del soluto por unidad de volumen del fluido. Notemos que la concentración del soluto es al mismo tiempo igual a la masa por unidad de volumen del espacio físico, puesto que los volúmenes del fluido y del espacio físico en el cual está contenido son iguales.

Una vez establecida la relación entre la masa del soluto y su concentración para el transporte de solutos en un fluido libre, el siguiente objetivo es plantear la ecuación diferencial que gobierna el transporte de solutos en fluidos libres, y su condición de salto correspondiente, para ello notemos que la propiedad intensiva asociada a la masa del soluto, $M_s(t)$, es la concentración, $c(\underline{x},t)$; es decir, $\psi(\underline{x},t) = c(\underline{x},t)$, en vista de las ecuaciones (2.5) y (2.6) el transporte de un soluto en un fluido libre está gobernado por la ecuación diferencial

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}c) = \nabla \cdot \underline{\tau}_s + g_s \tag{3.2}$$

$\forall\, \underline{x} \in B(t)$, y por la condición de salto

$$[c(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\tau}_s] \cdot \underline{n} = 0. \tag{3.3}$$

$\forall \underline{x} \in \Sigma(t)$,se utilizó el hecho que no existen fuentes concentradas, es decir, $g_\Sigma(x,t) = 0$. En la ecuación (3.2) g_s es la masa del soluto que se genera o se destruye el interior del cuerpo $B(t)$ por unidad de volumen por unidad de tiempo.

En el caso más general de transporte puede haber generación de masa en el interior, por ejemplo la cual puede ser debido a reacciones químicas que sinteticen el soluto o a decaimiento radiocativo. Por otra parte, $\underline{\tau}_s$ es un campo vectorial con la propiedad de que en cualquier punto de la frontera, $\partial B(t)$, de un cuerpo, el flujo de masa de un soluto (masa por unidad de área por unidad de tiempo) que entra o sale a través de la frontera es igual a $\underline{\tau}_s \cdot \underline{n}$, donde $\underline{n}$ es la normal exterior a la frontera. Aquí podemos decir entra o sale, dependiendo de que el signo sea positivo o negativo, respectivamente.

3.1. Transporte de Solutos

En esta sección presentamos de manera general los procesos que intervienen directamente en el transporte de solutos. Existen dos clases de modelos de transporte de sustancias disueltas en un fluido: transporte de solutos en fluidos libres y transporte en fluidos en medios porosos; es decir, fluidos

cuyo movimiento está restringido al espacio disponible en un medio poroso. Aunque nuestro estudio se limitará al análisis de transporte en fluidos libres.

Para poder aplicar los modelos es necesario conocer la velocidad de las partículas del fluido, $\underline{v}(\underline{x}, t)$, como función de la posición $\underline{x}$ y del tiempo t. Sin embargo, para aplicar los modelos de transporte de solutos no es indispensable calcular la velocidad del fluido utilizando los modelos de flujo y, en muchos casos, tampoco es práctico. Por ejemplo, si queremos modelar el transporte de contaminantes, algunos casos particulares son: en un río, en las aguas subterráneas que se utilizan para abastecer alguna comunidad o en la atmósfera; lo más frecuente es que los datos correspondientes a las velocidades del fluido sean obtenidos de estaciones de observación, establecidas con este propósito.

3.1.1. Procesos del Transporte

Es importante señalar que es posible distinguir 3 tipos de procesos; advección, difusión, y no conservativo que tiene lugar en el transporte de solutos.

Definición 2 ***Advección.***

Se dice que hay advección siempre que la velocidad de las partículas del fluido es diferente de cero $\underline{v} \neq 0$. *Este fenómeno se debe a que la sustancia disuelta es arrastrada por el fluido en su movimiento. Siempre que el fluido no está en reposo, hay advección (o transporte).*

Definición 3 ***Difusión.***

Decimos que hay difusión en un fluido siempre que a nivel microscópico podemos observar que las partículas se mueven. A su movimiento se le llama movimiento browniano y tiene carácter aleatorio. Cuando una sustancia está disuelta en un fluido, ella es arrastrada por el movimiento browniano y su concentración tiende a igualarse en todos los puntos del espacio. El hecho de que un fluido esté en reposo desde un punto de vista macroscópico, no

significa que las partículas microscópicas que lo conforman no se muevan, pues ellas están en agitación constante.

Definición 4 ***Procesos no conservativos.***

De manera general, son aquellos que alteran la conservación de la masa. Sus origenes son diversos, mencionaremos dos de ellos de mayor importancia, como son el decaimiento radioactivo del soluto y la interacción química del soluto con otras sustancias presentes en el sistema que se modela.

Decaimiento Radioactivo:

El modelo más sencillo y ampliamente usado para el decaimiento radioactivo, corresponde a tomar g como una función lineal de la concentración del soluto, $c(\underline{x},t)$; es decir, $g_s(\underline{x},t) = -\lambda c(\underline{x},t)$, tal que λ es un escalar positivo. Considerando $g_s(\underline{x},t)$ de esta forma se obtiene resultados muy satisfactorios para predecir el fenomeno de decaimiento radioactivo. Una forma muy sencilla de expresar el decaimiento radioactivo es considerar un fluido en reposo; es decir, $\underline{v}(\underline{x},t) = 0$ y suponiendo que no hay difusión $\underline{\tau}_s = 0$ entonces la ecuación (3.2) se reduce a

$$\frac{\partial c(\underline{x},t)}{\partial t} = -\lambda c(\underline{x},t) \tag{3.4}$$

la solución analítica de esta ecuación es

$$c(\underline{x},t) = c_0(\underline{x})e^{-\lambda t}. \tag{3.5}$$

Donde $c_0(\underline{x})$ es la concentración inicial, la solución nos ilustra que pasado cierto tiempo la concentración del soluto en la posición $\underline{x}$ al tiempo t disminuye. Claro ejemplo de Decaimiento Radioactivo.

Interacción Química:

Un caso partícular de éste proceso, es cuando hay varias sustancias disueltas que reaccionan para sintetizar la masa del soluto cuyo transporte se modela; es decir, transferencia de masa de una sustancia a otra a escala molecular. Dando lugar a una contribución de $g_s \neq 0$.

En los fluidos libres, ya sea cuando se encuentra en reposo o en movimiento siempre está presente el proceso de difusión que es debido a la agitación molecular y que, por lo mismo, se le conoce como *difusión molecular*, es importante hacer notar que existen modelos de sistemas en los cuales no se le incluye debido a que su magnitud es tan pequeña que los resultados no se ven afectados; es decir la *difusión molecular*, en mayor o menor magnitud siempre existe.

El modelo más sencillo, y ampliamente utilizado, para la difusión molecular es la llamada "*ley de Fick*". La cual modela a $\mathcal{I}_s$ como una función lineal del gradiente de la concentración del soluto, ∇c. Notemos que tanto $\mathcal{I}_s$ como el gradiente de la concentración, son cantidades vectoriales tridimensionales. Es decir, $\mathcal{I}_s$ se escribe como

$$\mathcal{I}_s = \underline{D} \cdot \nabla c. \tag{3.6}$$

Aquí hemos usado la transformación lineal más general, tal que un vector tridimensional se puede escribir como el producto de una matriz cuadrada de 3x3 por otro vector, en la igualdad anterior la matriz $\underline{D}$ es el *tensor de difusión molecular*. En fluidos libres la difusión, en casos habituales, es *isotrópica;* es decir el *tensor de difusión molecular* es un múltiplo de la matriz identidad. Entonces

$$\underline{D} = D\underline{\mathrm{I}} \tag{3.7}$$

donde D es un coeficiente escalar positivo, se le llama *coeficiente de difusión*. La magnitud numérica del coeficiente de difusión indica la facilidad para la transferencia de masa; es decir, a mayor magnitud mayor transferencia de masa. Considerando la "*ley de Fick*" para la difusión molecular y usando la hipótesis para el caso isotrópico (sin preferencia de dirección) de las partículas, la ecuación (3.2) se convierte en

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v} c) = \nabla \cdot (D \nabla c) + g_s \tag{3.8}$$

$\forall \underline{x} \in B(t)$ y con la condición de salto

$$[c(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - D\nabla c] \cdot \underline{n} = 0 \tag{3.9}$$

para todo $\underline{x} \in \Sigma$.

3.2. Modelos Completos

Una vez que se han planteado las ecuaciones que gobiernan el transporte de solutos por fluidos libres y mencionado los procesos que intervienen de manera directa en este fenómeno, necesitamos que nuestro modelo sea *completo*. Decimos que el modelo de un sistema es *completo* si define un problema *bien planteado*. Un problema de valores iniciales y condiciones de frontera es *bien planteado* si cumple que:

i) Existe una y sólo una solución y,

ii) Ésta depende de manera continua de las condiciones iniciales y de frontera del problema.

Es decir, un modelo completo es aquél en el cual se incorporan condiciones iniciales y de frontera que definen conjuntamente con las ecuaciones diferenciales un problema bien planteado.

3.2.1. Condiciones Iniciales y de Frontera

En esta subsección se enuncian de manera general las condiciones iniciales y de frontera que son esenciales para definir un problema *bien planteado* de ecuaciones diferenciales.

1 **Condiciones Iniciales**

$$c(\underline{x}, 0) = c_0(\underline{x}) \tag{3.10}$$

la cual expresa el valor de la función al tiempo inicial $t = 0$.

2 **Condiciones de Frontera**

a) **Condiciones tipo Dirichlet**

$$c(\underline{x}, t) = f(\underline{x}) \tag{3.11}$$

especifica los valores que la función $c(\underline{x}, t)$ toma en la frontera $\partial B(t)$.

b) **Condiciones tipo Neumann**

$$\nabla c(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} = g(\underline{x}) \tag{3.12}$$

aquí se conoce el valor de la derivada de la función $c(\underline{x}, t)$ con respecto a la normal $\underline{n}$ a lo largo de la frontera $\partial B(t)$.

c) **Condiciones tipo Robin**

$$a(\underline{x})c(\underline{x}, t) + b(\underline{x})\nabla c(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} = \gamma(\underline{x}) \tag{3.13}$$

$\forall\, \underline{x} \in \partial B(t)$, está condición es una combinación de las dos anteriores.

3.3. Planteamiento del Problema de Transporte a Estudiar

En esta sección se hace el planteamiento del problema de transporte en el cual se centra el análisis de este trabajo. Dada la ecuación diferencial que gobierna el transporte de solutos en fluidos libres

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}c) = \nabla \cdot (D\nabla c) + \mathrm{g}_s \tag{3.14}$$

con condiciones de frontera tipo Dirichlet. Consideremos el caso en el cual $\underline{v}$ es un función constante; es decir, independiente de la posición y del tiempo, entonces la ecuación de arriba se convierte en

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underline{v}\nabla \cdot c = D\nabla \cdot \nabla c + g_s \tag{3.15}$$

para su estudio, consideremos el caso en que la concentración es independiente del tiempo (caso estacionario); es decir, $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$. Supondremos que hay conservación; es decir, no hay procesos no conservativos lo cual implica que $g_s = 0$.

Utilizando las hipótesis dadas, la ecuación se reduce a

$$-D\nabla^2 c + \underline{v}\nabla \cdot c = 0 \tag{3.16}$$

la cual es conocida como ecuación de Advección-Difusión caso estacionario. Al considerar este caso estacionario con la derivada de segundo orden, podemos decir que esta ecuación diferencial es una ecuación tipo elíptica.

Para hacer nuestro análisis, consideraremos el caso unidimensional definido sobre el dominio $[0, 1]$.

$$-D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \tag{3.17}$$

$\forall\ x \in [0, 1]$.

El plantear el problema de manera unidimensional nos favorece ya que se tiene un mejor control de las situaciones que puedan ocurrir en su análisis. Por ello trabajaremos con el problema de transporte caso unidimensional

4. Métodos de Solución

En este capítulo obtenemos la solución de la ecuación de transporte para fluidos libres utilizando el Método Análitico y se plantea de manera general el esquema para el Método de Diferencias Finitas y Elemento Finito para hallar la solución numérica.

Para obtener la solución y hacer nuestro análisis daremos condiciones de frontera tipo Dirichlet, $c(0) = 0$ y $c(1) = 1$ a la ecuación

$$-D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \mathrm{v}\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \tag{4.1}$$

$\forall\, x \in [0, 1]$.

4.1. Solución Analítica

La ecuación característica ver [2], asociada a la ecuación (4.1) es

$$r(-Dr + \mathrm{v}) = 0 \tag{4.2}$$

cuyas raíces son $r_1 = 0$ y $r_2 = \frac{\mathrm{v}}{D}$, por lo tanto la solución es

$$c(x) = c_1 + c_2 e^{\frac{\mathrm{v}}{D}x} \tag{4.3}$$

utilizando las condiciones de frontera tenemos

$$\begin{aligned} c(0) &= c_1 + c_2 = 0 \\ c(1) &= c_1 + c_2 e^{\frac{\mathrm{v}}{D}} = 1 \end{aligned} \tag{4.4}$$

resolviendo para c_1 y c_2 se obtiene la solución que es

$$c(x) = \frac{e^{\mathrm{v}x/D} - 1}{e^{\mathrm{v}/D} - 1} \tag{4.5}$$

$\forall\, x \in [0, 1]$, función que nos indica el grado de concentracción de cierta partícula en la posición x.

4.1.1. Análisis de la Solución

Tomando en cuenta que la solución anterior queda en términos de v y D; es decir, del coeficiente correspondiente a la advección y difusión respectivamente. Consideremos tres casos para su análisis:

I Sea $\frac{v}{D} = 1$; es decir, la velocidad de las partículas es igual a la capacidad que tienen para difundirse en el medio, entonces la solución se convierte en

$$c(x) = \frac{e^x - 1}{e - 1} \tag{4.6}$$

$\forall\ x \in [0, 1]$, cuya gráfica se ilustra a continuación en la Figura (2).

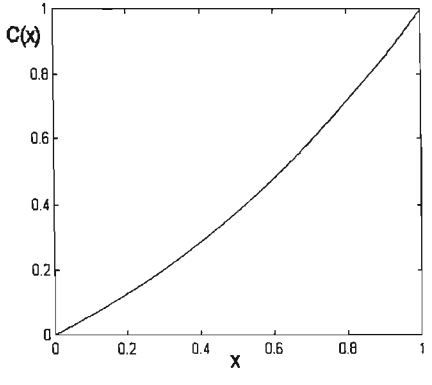

Figura 2: Solución analítica del problema (4.5) con el término advectivo igual al difusivo, $v = D$, caso I.

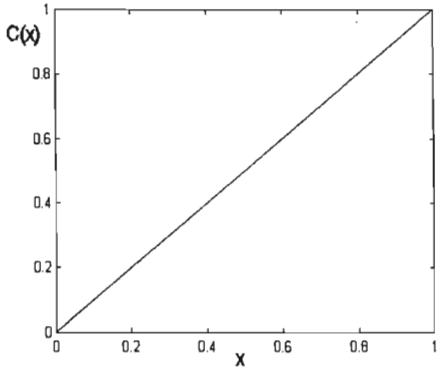

Figura 3: Solución analítica del problema (4.5) considerando una difusión mayor con respecto a la velocidad de las partículas, $v \ll D$, caso II.

II Sea $\frac{v}{D} \ll 1$; es decir, caso en el cual la difusión de las partículas es mucho mayor que su velocidad con la cual se mueven. Consideremos $y = \frac{v}{D}$, entonces sustituyendo en la solución tenemos

$$c(x) = \frac{e^{yx} - 1}{e^{y} - 1}$$

como $y \ll 1$, en la solución existe una indeterminación cuando y es cero, para evitar esta indeterminación se usa la Regla de L´Hopital, derivando el numerador y el denominador de la solución obtenemos

$$\lim_{y \to 0} \frac{x e^{yx}}{e^{y}} = \lim_{y \to 0} x e^{y(x-1)} = x$$

$\forall\, x \in [0, 1]$, entonces la solución aproximada es

$$c(x) \simeq x \tag{4.7}$$

la cual es una línea recta interpolando los valores de la frontera, ver

figura (3); que es la solución del problema

$$-\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0.$$

III Sea $\frac{v}{D} \gg 1$, caso inverso al anterior; es decir, aqui las partículas se mueven a una velocidad mucho mayor con la cual se difunden, entonces los términos exponenciales alcanzan valores grandes, así la solución (4.5) se aproxima a

$$c(x) = \frac{e^{vx/D}}{e^{v/D}} = e^{-\left[\frac{v}{D}(1-x)\right]}. \tag{4.8}$$

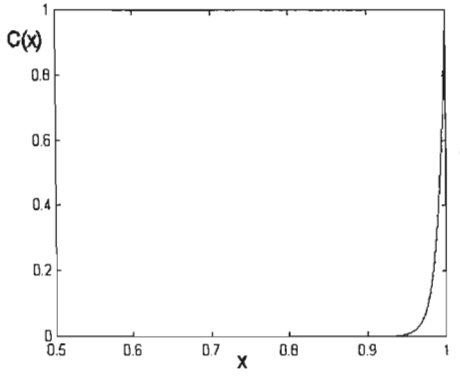

Figura 4: Solución analítica del problema (4.5) con una velocidad mayor que la difusión, $v \gg D$, caso III.

Nótese que el exponente es grande y negativo, por lo tanto la función anterior está muy cercana a cero en una vecindad del cero, y muy cercana a uno en una vecindad muy pequeña alrededor del uno; de

tal forma que la solución alcanza el valor 1 con un comportamiento exponencial.

El análisis anterior es de gran importancia ya que nos ilustra el comportamiento de la solución para diferentes valores del cociente de v y D; es decir, la razón de la velocidad de las particulas con su capacidad para difundirse en el medio. Este cociente es de gran importancia ya que está relacionado con el número de Péclet y será tratado con mayor detalle en el comportamiento de la solución obtenida de manera numérica en el capítulo 6.

4.2. Planteamiento de los Métodos a Considerar en la Solución Numérica

Las técnicas numéricas aplicadas más frecuentemente, tienen en común la búsqueda de una solución aproximada de las variables principales, en puntos discretos tanto del espacio (nodos) y el tiempo. Utilizando las técnicas de discretización e interpolación, las ecuaciones diferenciales pueden sustituirse por sistemas de ecuaciones algebraicas, cuyas incógnitas son los valores nodales de las variables principales.

La escala de la discretización determina la resolución y, junto con la técnica de interpolación elegida, la fiabilidad de la solución resultante, una discretización demasiado fina da lugar a un número excesivamente grande de incógnitas. Por otra parte, la estabilidad del proceso de resolución numérica puede restringir la libre elección de la escala de discretización espacial o temporal.

Los Métodos numéricos se diferencian en la forma de obtener las ecuaciones algebraicas:

4.2.1. Diferencias Finitas

Este método consiste en una aproximación de derivadas parciales por expresiones algebraicas envolviendo los valores de la variable dependiente

en un limitado número de puntos seleccionados, las aproximaciones a las derivadas se obtienen a través de las series de Taylor truncadas; es decir, se discretiza el dominio espacial en una malla cuadrangular, donde las incógnitas son el valor de la función buscada en los nodos. La ecuación diferencial es aproximada en los puntos seleccionados usando interpolación polinomial.

Para discretizar la ecuación de transporte (4.1), se considera una partición uniforme de tamaño h para aproximar las derivadas tanto de primer orden como de segundo.

a) Aproximación a la primera derivada, *diferencias centrales*

$$\frac{\partial c(x)}{\partial x} = \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2h} + O(h^2) \tag{4.9}$$

b) Aproximación a la segunda derivada, *diferencias centrales*

$$\frac{\partial^2 c(x)}{\partial x^2} = \frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{h^2} + O(h^2). \tag{4.10}$$

Las aproximaciones anteriores tienen un término $O(h^2)$, llamado "*error local de truncamiento*" de la aproximación, el cual es el residuo en la expansión en series de Taylor. Su análisis es importante, pues da información sobre el orden del error de la aproximación, que está definido por la potencia de h.

Sustituyendo las aproximaciones (4.9) y (4.10) en la ecuación (4.1) tenemos

$$-D\frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{h^2} + \mathrm{v}\frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2h} = 0 \tag{4.11}$$

$\forall\ i = 1, 2, ..., E-1$, esta discretización nos da un sistema de ecuaciones algebraicas el cual debe ser resuelto para así obtener el valor de la función en los nodos.

Cabe señalar que el método de diferencias finitas tiene otras variantes, tales como diferencias finitas *hacía atrás* o *hacía adelante*. Aquí se usaron diferencias finitas centrales, las cuales son más precisas.

Cuando aproximamos la ecuación (4.1), por expresiones algebraicas, lo que generamos es un sistema de ecuaciones con igual número de ecuaciones que de incógnitas.

El plantear nuestra ecuación por el método de diferencias finitas, nos permite resolver para valores de concentración en cada punto de interés de la malla. Si además los valores en la frontera del intervalo que se considera son datos del problema, este caso es conocido como condiciones de frontera tipo Dirichlet.

Si expresamos la ecuación (4.11) como un sistema de ecuaciones de la forma

$$\underline{A}\,\underline{c} = \underline{b}$$

tenemos que

$$\underline{A} = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & . & . & . & 0 \\ c_2 & a_2 & b_2 & . & & & . \\ 0 & . & . & . & . & & . \\ . & & . & . & . & . & . \\ . & & & . & . & . & 0 \\ . & & & & c_{E-2} & a_{E-2} & b_{E-2} \\ 0 & . & . & . & 0 & c_{E-1} & a_{E-1} \end{pmatrix}, \quad \text{con} \quad \begin{array}{l} a_i = 2D, \\ b_i = -D + \frac{vh}{2}, \\ c_i = -D - \frac{vh}{2}, \end{array}$$

siendo el miembro de la derecha

$$\underline{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ . \\ . \\ \frac{1}{h^2} - \frac{v}{2h} \end{pmatrix}$$

Estas $E-1$ ecuaciones lineales se ven complementadas con las condiciones de frontera

$$c_0 = 0, \quad c_E = 1.$$

Para calcular la solución numérica

$$\underline{c} = \begin{pmatrix} c_1, & . & . & , & c_{E-1} \end{pmatrix}^T,$$

es necesario resolver el sistema tridiagonal, obteniendo los valores de concentración en cada punto de interés de la malla.

4.2.2. Elemento Finito

Este método hace una subdivisión del dominio en pequeños elementos de geometría sencilla. En nuestro caso es dividir el dominio $[0,1]$, en el cual está definida la ecuación diferencial; las variables principales se determinan en cada elemento mediante funciones de interpolación, siendo las incógnitas los valores nodales. En este trabajo consideramos funciones lineales $\phi(x)$ y se hace uso del Método Galerkin de Elemento Finito, en el cual las funciones base y las de peso son las mismas, ver [6].

A continuación se muestra la solución utilizando el Método Galerkin de Elemento Finito.

Consideremos la ecuación de transporte

$$-Dc''(x) + \mathrm{v}c'(x) = 0 \tag{4.12}$$

$\forall\ x \in [0,1]$, tal que $c(0) = 0$ y $c(1) = 1$. Aqui hemos hecho un cambio en la notación, los super-índices, prima y biprima denotan la primera y segunda derivada con respecto a x.

Utilizaremos elementos lineales por tramos, esto es, funciones $\phi_j(x)$, $j = 1, 2, ..., E-1$ que representa un conjunto de funciones base, ver figura (5).

Definimos la función $\hat{c}(x)$ aproximando a $c(x)$ como una combinación de las funciones ϕ_j

$$\hat{c}(x) = \sum_{j=0}^{E} c_j \phi_j(x) \tag{4.13}$$

donde las constantes $\{c_j\}_{j=0}^{E}$ son las que tenemos que encontrar; la función $\hat{c}(x)$, debe satisfacer las condiciones de frontera, $\phi_j(x) = 0\ \forall j = 1, 2, ..., E-1$ en $x = 0$ y $x = 1$, es decir, son funciones que se desvanecen en la frontera.

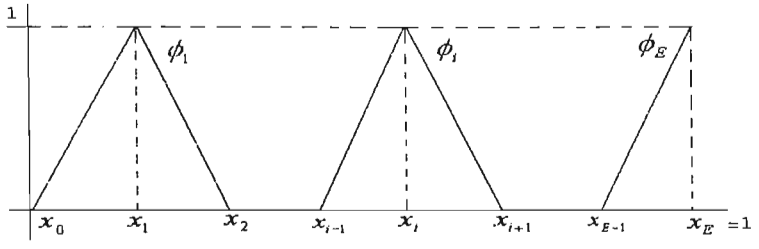

Figura 5: Esquema que representa las funciones lineales base para la construcción de la función aproximada $\hat{c}(x)$, asociadas con los nodos internos y de frontera..

Como primer paso multiplicamos la ecuación (4.12) por las funciones de peso $\phi_i(x)$, $i = 1, 2, ..., E-1$, tal que $\phi_i(x) \in C^1[0,1]$, por el método Galerkin ver [6], sabemos que estas funciones son las mismas que las funciones base, el producto resultante lo integramos sobre el dominio $[0,1]$, es decir

$$\int_0^1 \left[-Dc''(x) + \mathrm{v}c'(x)\right] \phi_i(x)dx = 0,$$

donde $i = 1, 2, ..., E-1$, desarrollando el producto en el integrando obtenemos

$$\int_0^1 \left[-Dc''(x)\phi_i(x) + \mathrm{v}c'(x)\phi_i(x)\right] dx = 0.$$

Aplicando la integración por partes únicamente para el primer sumando en la integral, para lo cual hacemos uso de la siguiente igualdad

$$(c'(x)\phi_i(x))' = c'(x)\phi_i'(x) + \phi_i(x)c''(x),$$

sustituyendo ésta igualdad en la integral anterior obtenemos

$$\int_0^1 Dc'(x)\phi_i'(x) - D(c'(x)\phi_i(x))' + \mathrm{v}c'(x)\phi_i(x)dx = 0.$$

Utilizando el teorema fundamental del cálculo para integrales, la ecuación anterior se reduce a

$$\int_0^1 Dc'(x)\phi_i'(x) + \mathrm{v}c'(x)\phi_i(x)dx = D(c'(x)\phi_i(x))\Big|_0^1$$

donde el lado derecho de la ecuación anterior es igual a cero, ya que las $\phi_i(x)$ son idénticamente cero en la frontera. Por lo tanto tenemos que

$$\int_0^1 Dc'(x)\phi_i'(x) + \mathrm{v}c'(x)\phi_i(x)dx = 0. \tag{4.14}$$

La integral anterior la podemos denotar como

$$a(c, \phi_i(x)) = \int_0^1 Dc'(x)\phi_i'(x) + \mathrm{v}c'(x)\phi_i(x)dx \tag{4.15}$$

tal que $a(\cdot,\cdot)$ es una forma bilineal, ver [7].

Sustituyendo la función aproximada (4.13) en la ecuación (4.14) obtenemos

$$\int_0^1 D\hat{c}'(x)\phi_i'(x) + \mathrm{v}\hat{c}'(x)\phi_i(x)dx =$$

$$\int_0^1 \left[D\left(\sum_{j=0}^{E} c_j\phi_j'(x)\phi_i'(x)\right) + \mathrm{v}\left(\sum_{j=0}^{E} c_j\phi_j'(x)\phi_i(x)\right)\right] dx = 0$$

utilizando la linealidad de la integral, la ecuación anterior se reduce a

$$\sum_{j=0}^{E} c_j \int_0^1 \left[D\phi_j'(x)\phi_i'(x) + \mathrm{v}\phi_j'(x)\phi_i(x)\right] dx = 0.$$

Considerando que el soporte de las funciones $\phi_i(x)$ es $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ y tomando i fija, la ecuación anterior se reduce a

$$D\left[c_{i-1}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\phi_{i-1}^{'}\phi_i^{'}dx + c_i\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}(\phi_i^{'})^2dx + c_{i+1}\int_{x_i}^{x_{i+1}}\phi_{i+1}^{'}\phi_i^{'}dx\right] +$$

$$\mathrm{v}\left[c_{i-1}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\phi_{i-1}^{'}\phi_i dx + c_i\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}\phi_i^{'}\phi_i dx + c_{i+1}\int_{x_i}^{x_{i+1}}\phi_{i+1}^{'}\phi_i dx\right] = 0 \qquad (4.16)$$

entonces, para i fija el soporte de la función $\phi_i(x)$ se intercepta con el soporte de las funciones $\phi_{i+1}(x)$ y $\phi_{i-1}(x)$, obteniendose las integrales anteriores. Consideremos una partición uniforme en el intervalo $[0,1]$, tal que x_i=x_{i-1}+h para $i = 1, 2, ...,E$, y notando que $\phi_j^{'}(x) = \frac{1}{h}$ para $x_{j-1} \leq x \leq x_j$ y $\phi_j^{'}(x) = -\frac{1}{h}$ para $x_j \leq x \leq x_{j+1}, \forall\ j = 1, 2, ...E-1$, entonces haciendo los cálculos necesarios la ecuación (4.16), se reduce a

$$\frac{D}{h}(-c_{i-1} + 2c_i - c_{i+1}) + \frac{1}{2}\mathrm{v}(c_{i+1} - c_{i-1}) = 0. \qquad (4.17)$$

$\forall\ i = 1, 2, ...E-1$, tal que las condiciones de frontera son las siguientes

$$c_0 = 0, \quad c_E = 1.$$

Notemos que la ecuación anterior genera un sistema de ecuaciones $\underline{A}\ \underline{c}$=$\underline{b}$ con igual número de incognitas que ecuaciones.

Un punto muy importante a mencionar es el error de convergencia para elemento finito donde el orden de convergencia del error es $O(h^{n+1})$, tal que n es el grado de los polinomios de la base; para este caso son polinomios lineales por lo tanto el error es de orden $O(h^2)$, ver [6]

Si la ecuación anterior la multiplicamos por $\frac{1}{h}$ y reordenamos las variables, obtenemos

$$-D\frac{(c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1})}{h^2} + \mathrm{v}\frac{(c_{i+1} - c_{i-1})}{2h} = 0 \qquad (4.18)$$

lo cual nos da el mismo sistema de ecuaciones lineales que fue hallado con Diferencias Finitas. El análisis de estos dos métodos será visto con mayor detalle en el capítulo 6.

5. Número de Péclet

En este capítulo se introduce el número de Péclet el cual es de gran importancia en la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) para problemas de Advección-Difusión, en donde existen dificultades cuando se presenta casos de advección dominante. Abordaremos el número de Péclet de manera global y local; es decir, global nos estamos refiriendo a un análisis de el dominio (longitud total), donde está definida la ecuación y local a la forma de como se comporta la solución a partir del tamaño de cada subintervalo de la partición del dominio.

5.1. Número de Péclet Global y Local

Dada una ecuación diferencial parcial podemos obtener su solución numérica, ya sea por el Método de Diferencias Finitas (FD) o por el Método de Elemento Finito (FEM). Fundamentalmente ambos métodos utilizan el concepto de discretización para aproximar a la solución exacta de la ecuación diferencial parcial, en que un dominio continuo es separado en un número de subáreas adyacentes.

Consideremos una ecuación diferencial de la siguiente forma (caso unidimensional)

$$-(Dc')'(x) + (\mathrm{v}c)'(x) + (\gamma c)(x) = f(x) \tag{5.1}$$

tal que $x \in [0,1]$ y $c(0) = 0$; $c(1) = 1$.

La ecuación anterior es usada para describir procesos de advección, difusión y adsorción (o reacción) de cierta cantidad, en nuestro caso concentración del soluto, $c(x)$. Consideremos para este caso D, v y γ funciones independientes de x. El término $-(Dc')'$ es el responsable de la difusión, $(\mathrm{v}c)'$ para la advección (o transporte) y γc para la adsorción (si $\gamma > 0$).

Una vez definidos los términos de la ecuación de transporte caso Advectivo-Difusivo, enunciamos las siguientes definiciones las cuales son de importancia

para el análisis de la solución numérica de la ecuación (5.1).

Definición 5 ***Número Global de Péclet***

El número Global de Péclet se define como

$$\mathbb{P}_{e_{gl}} = \frac{|v|}{2D} L \tag{5.2}$$

donde L es el tamaño del dominio.

El número de Péclet mide la dominancia del término advectivo sobre el difusivo.

De manera análoga podemos definir el número local de Péclet

Definición 6 ***Número Local de Péclet***

El número local de Péclet se define como

$$\mathbb{P}_e = \frac{|v|}{2D} h \tag{5.3}$$

donde h es el tamaño del subintervalo de la partición del dominio.

Para nuestros propósitos se considera una partición uniforme.

5.2. Importancia del Número de Péclet

Como se enunció anteriormente, el número de Péclet se define a partir del término advectivo, difusivo y longitud del intervalo a analizar.

La importancia del número de Péclet, radica esencialmente en que a través de él, se puede hacer un análisis de la relación que existe entre los términos advectivo y difusivo. Para analizar la solución numérica obtenida por los métodos de diferencias finitas o elemento finito, y la solución obtenida de manera analítica de la ecuación diferencial parcial, se necesita tener en cuenta la magnitud de los términos advectivo y difusivo ya que las dificultades que se presentan en la solución del problema de transporte está en función de la

relación entre ellos, y dado que el número de Péclet está definido a partir de estos, es de gran importancia analizarlo para eliminar tales dificultades.

Los métodos numéricos para hallar la solución de la ecuación se basan fundamentalmente en discretizar el domino, de aquí que el número local de Péclet esté involucrado, es decir, al obtener la solución de nuestro problema; nuestro interés está enfocado en saber cual es la mejor aproximación numérica a la solución analítica, y con la relación que existe entre los métodos numéricos y el número de Péclet, esto se vuelve más fácil. Para ello analizaremos el número de Péclet de manera local, el cual también depende de h.

6. Comportamiento de los Métodos Numéricos

En el presente capítulo se analiza el comportamiento de los métodos numéricos en la solución de la ecuación de transporte (4.12), para ello se utilizan las ecuaciones *lineales* en *diferencias* con las cuales se muestran lo problemas en la solución numérica hallada con los métodos Galerkin de Elemento Finito y Diferencias Finitas. Se analiza la relación con el Método de Diferencias Finitas y se proponen otros métodos de aproximación, dadas las variantes que ofrece las Diferencias Finitas se utiliza una de ellas para resolver los problemas que se enfrentan los 2 métodos mencionados.

6.1. Elemento Finito

Con el método de Elemento Finito se obtuvo el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas aproximando a la ecuación (4.12)

$$\frac{D}{h}\left(-c_{i-1}+2c_i-c_{i+1}\right)+\frac{1}{2}\mathrm{v}\left(c_{i+1}-c_{i-1}\right)=0\ \forall i=1,...,E-1$$

si multiplicamos esta ecuación por $\frac{h}{D}$, se tiene

$$\left(-c_{i-1}+2c_i-c_{i+1}\right)+\frac{\mathrm{v}h}{2D}\left(c_{i+1}-c_{i-1}\right)=0,$$

agrupando términos semejantes, tenemos

$$\left(\frac{\mathrm{v}h}{2D}-1\right)c_{i+1}+2c_i-\left(\frac{\mathrm{v}h}{2D}+1\right)c_{i-1}=0. \tag{6.1}$$

Ahora, utilizando la definición del número local de Péclet, la ecuación anterior se convierte en

$$\left(\mathbb{P}_e-1\right)c_{i+1}+2c_i-\left(\mathbb{P}_e+1\right)c_{i-1}=0 \tag{6.2}$$

la cual es una ecuación *lineal* en *diferencias* de orden 2, ver [7], con coeficientes constastes, cuya solución es de la forma

$$c_i = A_1\rho_1^i + A_2\rho_2^i \tag{6.3}$$

donde A_1 y A_2 son constantes y ρ_1, ρ_2 son las dos raíces de la ecuación característica, ver [7]. Entonces nuestro problema se transforma en uno de ecuaciones *lineales* en *diferencias* de orden 2 de la forma siguiente

$$(\mathbb{P}_e - 1)\rho^2 + 2\rho - (\mathbb{P}_e + 1) = 0. \tag{6.4}$$

el cual se resuelve hallando las raices a la ecuación anterior

$$\rho_{1,2} = \begin{cases} \frac{1+\mathbb{P}_e}{1-\mathbb{P}_e} \\ 1 \end{cases}$$

e imponiendo las condiciones de frontera en $x = 0$ y $x = 1$ obtenemos

$$\begin{aligned} c_0 &= A_1\rho_1^0 + A_2\rho_2^0 = 0 \\ c_E &= A_1\rho_1^E + A_2\rho_2^E = 1, \end{aligned}$$

al resolver para A_1 y A_2, se encuentra que

$$A_1 = \frac{1}{\left(\frac{1+\mathbb{P}_e}{1-\mathbb{P}_e}\right)^E - 1} \quad \text{y} \quad A_2 = -A_1.$$

Por lo tanto, la solución a la ecuación (6.2) es

$$c_i = 1 - \left(\frac{1+\mathbb{P}_e}{1-\mathbb{P}_e}\right)^i \Bigg/ 1 - \left(\frac{1+\mathbb{P}_e}{1-\mathbb{P}_e}\right)^E \tag{6.5}$$

$\forall i$=0, 1, 2, ..., E.

El comportamiento de la solución será visto en la siguiente sección.

6.1.1. Análisis de la Solución Considerando el Número de Péclet

Nótese que la solución (6.5) de la ecuación (6.2) queda en términos del número local de Péclet, entonces para analizar el comportamiento de la solución tenemos que considerarlo. Para ello se analizará el caso cuando $\mathbb{P}_e > 1$, notemos que en el numerador aparece una potencia con base negativa y para ciertos valores de i, el cociente cambia de signo, lo cual ocasiona oscilaciones de la solución aproximada con respecto a la solución analítica.

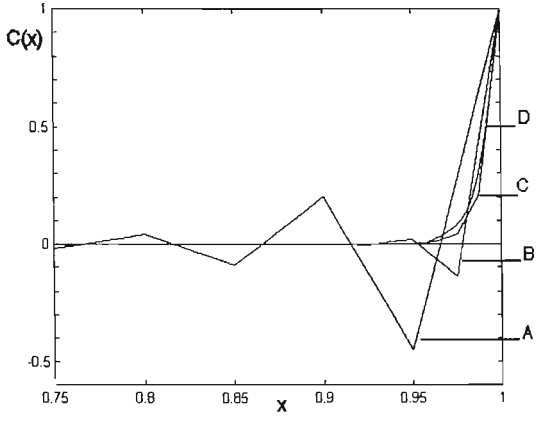

Figura 6: Solución en diferencias finitas centradas del problema de Advección-Difusión dada por la ecuación (4.12), para diferentes valores del número local de Péclet. Línea (A), $\mathbb{P}_e = 2.63$; línea (B), $\mathbb{P}_e = 1.28$; línea (C), $\mathbb{P}_e = 0.63$, línea (D) solución analítica.

La figura (6), muestra las oscilaciones que ocurren cuando el número local de Péclet es mayor que uno dada por la solución (6.5). Los valores de los términos advectivo y difusivo son los siguientes v= 110.5, $D = 1.052$, y el tamaño del elemento de la partición es, $h = 0.05$, $h = 0.025$, $h = 0.0125$ respectivamente. El programa de cómputo con el cual se muestra esta solución

se encuentra en el programa 1 detallado en el apéndice A.

El remedio más simple para prevenir oscilaciones consiste en hacer una elección suficientemente pequeña para el tamaño de h y de esta forma el nùmero de Péclet es menor que uno, $\mathbb{P}_e < 1$, a primera instancia esto parece resolvernos el problema de las oscilaciones. Sin embargo frecuentemente esta elección resulta impractica, ya que como sabemos el número local de Péclet depende de los términos advectivo y difusivo de la ecuaciòn, y para ciertos valores de estos, si se considera una elección de h pequeña, resulta que $\mathbb{P}_e > 1$, una estrategia que resulta infactible.

6.2. Diferencias Finitas

Al principio de este capítulo se obtuvo la solución por el método de elemento finito y como vimos existen problemas en la solución cuando el número local de Péclet es mayor que uno. En esta sección se analizará primeramente el comportamiento para la solución por el método de diferencias finitas centradas y posteriormente se tomará en cuenta alguna variante de éste método para evitar los problemas hallados con elemento finito. De la sección 4.2.1 se obtuvo la aproximación algebraica por el méodo de diferencias finitas *centradas* de la ecuación (4.12) la cual es

$$-D\frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{h^2} + \mathrm{v}\frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2h} = 0, \quad \forall i = 1, 2, ...E - 1. \tag{6.6}$$

se observó que es el mismo sistema de ecuaciones hallado con elemento finito. Entonces, dado que el esquema de diferencias finitas centradas y elemento finito es el mismo, la solución (6.5), obtenida por elemento finito es la misma que para diferencias finitas, la figura (6), muestra el problema de las oscilaciones para los dos métodos.

La relación que existe entre diferencias finitas y elemento finito puede ser provechosamente empleada para trazar un remedio para las oscilaciones en la solución (6.5), cuando el número de Péclet es mayor que 1.

La observación importante aquí, es que la inestabilidad en la solución por diferencias finitas es debido al hecho que el esquema de discretización es centrado, un posible remedio consiste en aproximar la primera derivada para diferencias finitas por un lado, conforme a la dirección del campo de transporte. Precisando, usamos la *diferencia hacia atrás* si el término advectivo, v, es positivo y la *diferencia hacia adelante* en otro caso.

6.2.1. Esquema Upwind

En esta sección se hará la aproximación a la primera derivada de la ecuación (4.12), con el esquema de *diferencias finitas hacia atrás* que se define como

$$c'(x) = \frac{c_i - c_{i-1}}{h} + O(h) \tag{6.7}$$

y se hace una comparación entre los esquemas *upwind* y *centrado*.

El esquema resultante cuando v> 0 es

$$-D\frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{h^2} + \mathrm{v}\frac{c_i - c_{i-1}}{h} = 0 \tag{6.8}$$

$\forall i = 1, 2, ..., E-1$, esta discretización lateral de la primera derivada, es llamada diferenciación *upwind* (en contraflujo), pero por el aumento de estabilidad del método, el precio a ser pagado es una perdida de exactitud ya que la diferencia finita *upwind* introduce un error de discretización local de orden $O(h)$ y no de $O(h^2)$ como ocurre en el caso de diferencias finitas *centradas*.

Para hacer uso de la nueva aproximación notemos la siguiente relación para la diferencia *upwind*

$$\frac{c_i - c_{i-1}}{h} = \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2h} - \frac{h}{2}\frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{h^2}, \tag{6.9}$$

es decir, la diferencia finita *upwind* puede ser interpretada como la suma de una diferencia finita centrada aproximando la primera derivada y de un término proporcional a la discretización de la derivada de segundo orden.

Entonces, sustituyendo la relación anterior en la ecuación (6.8) obtenemos

$$-D\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2}+\mathrm{v}\left(\frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h}-\frac{h}{2}\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2}\right)=0$$

agrupando términos semejantes tenemos

$$-\left(D+\frac{\mathrm{v}h}{2}\right)\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2}+\mathrm{v}\frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h}=0 \tag{6.10}$$

$\forall i = 1,2,...E-1$, reordenando y considerando el número local de Péclet obtenemos

$$-D\left(1+\frac{\mathrm{v}h}{2D}\right)\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2}+\mathrm{v}\frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h}=0$$

$\forall i = 1,2,...E-1$. Sea $D_h = D(1+\mathbb{P}_e)$, entonces la ecuación (6.10) se convierte en

$$-D_h\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2}+\mathrm{v}\frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h}=0 \tag{6.11}$$

$\forall i = 1,2,...E-1$. Así, la ecuación diferencial (4.12) ha sido remplazada con un término de perturbación

$$-D_h c''(x)+\mathrm{v}c'(x)=0, \tag{6.12}$$

usando diferencias finitas para aproximar a $c'(x)$ y $c''(x)$. La perturbación

$$-D\mathbb{P}_e c''(x)=-\frac{\mathrm{v}h}{2}c''(x) \tag{6.13}$$

es llamada *difusión artificial.*

La comparación entre las discretizaciones centrada y *upwind* del problema (4.12) se muestra en la figura 7.

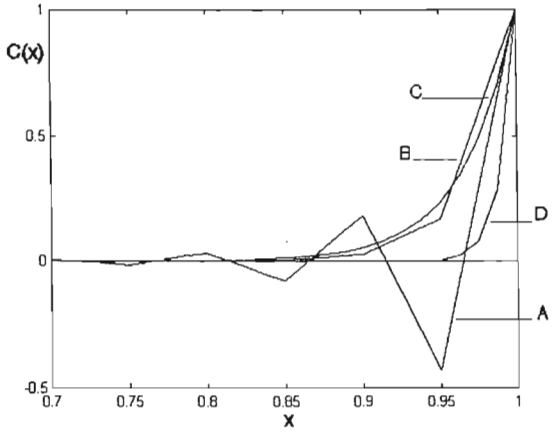

Figura 7: Solución en diferencias finitas de la ecuación (4.12), (con D=1/100, v=1). Usando diferencia finita centrada y $\mathbb{P}_e = 2.5$, línea (A); considerando la difusión artificial, líneas (B) y (C), $\mathbb{P}_e = 2.5$ y 0.625, respectivamente. Se consideraron particiones de tamaño h =0.05, para las soluciones (A) y (B); $h = 0.0125$ para (C). Nótese el efecto de eliminación de oscilaciones para $\mathbb{P}_e$ grande en la difusión artificial. Línea (D) denota la solución exacta.

La figura 7, muestra la solución con diferencias finitas, en la cual se nota un efecto de eliminación de las oscilaciones cuando el número de Péclet es grande $\mathbb{P}_e = 2.5$ utilizando la difusión artificial, inversamente nótese la perdida de exactitud en la línea C, para valores pequeños $\mathbb{P}_e = 0.625$.

Como se mencionó se pierde exactitud por el orden de error de truncamiento. El programa de cómputo con el cual se obtuvo la solución es el programa 2 que se encuentra en el apéndice A.

De lo anterior podemos concluir que al obtener la solución numérica de la ecuación

$$-D_h c''(x) + \mathrm{v}c'(x) = 0$$

aumentamos la estabilidad de la aproximación, aunque tengamos una perdida de exactitud.

La Difusión Artificial introducida, fue usando el hecho, que el término correspondiente a la advección, v es positivo, situación que hace que la solución numérica sea estable pero se pierde exactitud, ya que el error de discretización es de orden $O(h)$.

6.2.2. Esquema Scharfetter-Gummel

Teniendo en cuenta esta situación, en esta sección se hace una nueva aproximación a la primera derivada para evitar que el error de discretización sea de orden $O(h)$. Consideremos una aproximación a la primera derivada de la ecuación (4.12) como una combinación de la diferencia finita *centrada* y la diferencia finita *upwind* de la siguiente forma

$$c^{'}(x) = (1-\lambda)\frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h} + \lambda\frac{c_i - c_{i-1}}{h} \tag{6.14}$$

tal que $\lambda > 0$, usando la relación (6.9) tenemos que

$$c^{'}(x) = (1-\lambda)\frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h} + \lambda\left[\frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h} - \frac{h}{2}\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2}\right],$$

cancelando términos la ecuación anterior se reduce a

$$c^{'}(x) = \frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h} - \lambda\frac{h}{2}\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2}.$$

Entonces haciendo la discretización correspondiente en la ecuación (4.12) obtenemos

$$-D\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2} + \mathrm{v}\left[\frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h} - \lambda\frac{h}{2}\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2}\right] = 0$$

si agrupamos los términos semejantes, la ecuación anterior se reduce a

$$-D\left(1+\lambda\frac{\mathrm{v}h}{2D}\right)\frac{c_{i+1}-2c_i+c_{i-1}}{h^2} + \mathrm{v}\frac{c_{i+1}-c_{i-1}}{2h} = 0. \tag{6.15}$$

Sea $D_{\lambda h} = D\left(1 + \lambda\frac{vh}{2D}\right)$, un término de perturbación introducido, entonces tenemos

$$-D_{\lambda h}c''(x) + vc'(x) = 0 \tag{6.16}$$

que es la ecuación (4.12) con una *difusión artificial* dependiente del parámetro λ. Una buena elección de λ para este esquema hace que se obtenga una mejor exactitud, tal que el error de discretización es de orden $O(h^2)$ ver [9]. la elección de λ será visto con mayor detalle en la siguiente sección.

Obtenidos estos dos esquemas, la elección de utilizar alguno de los dos es libre y dependerá del problema a tratar; es decir, si queremos exactitud o estabilidad.

El introducir la *difusión artificial*, como su nombre lo indica, sólo es un término artificial que depende de manera directa del número local de Péclet y éste a su vez está dado en términos de h, por lo tanto, dependiendo de los parámetros y considerando una partición suficientemente grande, la *difusión artificial* puede ser tan pequeña que se puede despreciar. De aquí que es importante la escala de discretización para obtener la mejor aproximación a la solución.

6.2.3. Difusión Artificial

Una vez introducida la difusión artificial, podemos hacer un análisis de ella; es decir, considerando el esquema *upwind*, de manera más general podemos recurrir al esquema centrado considerado en la ecuación (6.6) con la siguiente difusión

$$D_h = D(1 + \phi(\mathbb{P}_e)) \tag{6.17}$$

donde ϕ es una función conveniente que tiene como argumento el número local de Péclet tal que satisface

$$\lim_{\mathbb{P}_e \to 0^+} \phi(\mathbb{P}_e) = 0. \tag{6.18}$$

Nótese que cuando $\phi(\mathbb{P}_e) = 0$ se recupera el método de diferencias finitas centrada (6.6); es decir, si $\phi(\mathbb{P}_e) = 0$ entonces $D_h = D$, mientras que si $\phi(\mathbb{P}_e) = \mathbb{P}_e$ se obtiene el esquema de diferencia finita *upwind* (6.11); de igual forma podemos recuperar el esquema (6.16) haciendo $\phi(\mathbb{P}_e) = \lambda\mathbb{P}_e$, con $\lambda > 0$.

Una vez obtenido el esquema (6.16), queremos hallar λ de tal fprma que el resultado que se obtenga de manera numérica sea igual al resultado de la solución exacta; es decir,

$$c_h(i) = c(x_i), \tag{6.19}$$

entonces para que nuestra solución numérica sea igual al resultado de la solución exacta en los nodos, haremos uso del siguiente Teorema 7.

Teorema 7 *Dada una ecuación diferencial parcial*

$$-(Dc')'(x) + (vc)'(x) + (\gamma c)(x) = f(x)$$

definida sobre un dominio $[a, b]$, *si* $f(x)$ *es una función continua por partes sobre el dominio de partición,* $[a, b]$, *entonces el esquema Scharfetter-Gummel da una solución* c_h^{SG} *la cual es nodalmente exacta; es decir;* $c^{SG}(x_i) = c(x_i)$ *para cada* x_i *independiente del valor de* h.

Para obtener λ, usamos el siguiente resultado; sea

$$\phi(t) = t - 1 + B(2t) \tag{6.20}$$

tal que $B(t)$ es la función de Bernoulli, ver [7], definida como $B(t) = \frac{t}{e^t - 1}$ $\forall\ t \neq 0$ y $B(0) = 1$, nótese que usamos t como variable. Sustituyendo $\mathbb{P}_e = t$ en la ecuación (6.20) obtenemos

$$\phi(\mathbb{P}_e) = \mathbb{P}_e - 1 + \frac{2\mathbb{P}_e}{e^{2\mathbb{P}_e} - 1},$$

con el objetivo de hallar λ, igualamos la función anterior con el término correspondiente a la *difusión artificial* dependiente del parámetro λ de la ecuación (6.16), esto es

$$\lambda\mathbb{P}_e = \mathbb{P}_e - 1 + \frac{2\mathbb{P}_e}{e^{2\mathbb{P}_e} - 1},$$

despejando λ obtenemos

$$\lambda = 1 - \frac{1}{\mathbb{P}_e} + \frac{2}{e^{2\mathbb{P}_e} - 1}. \tag{6.21}$$

Por lo tanto se ha encontrado el valor de λ tal que nos da el esquema de diferencia finita exponencial apropiado, el cual también es conocido como el Método Scharfetter-Gummel (SG).
Para el caso de estudio, $f(x) = 0$, del Teorema (7), sabemos que $c^{SG}(x_i) = c(x_i)$ para cada x_i independiente del valor de h, y por consiguiente también del número local de Péclet. Esto se muestra en la figura (8).

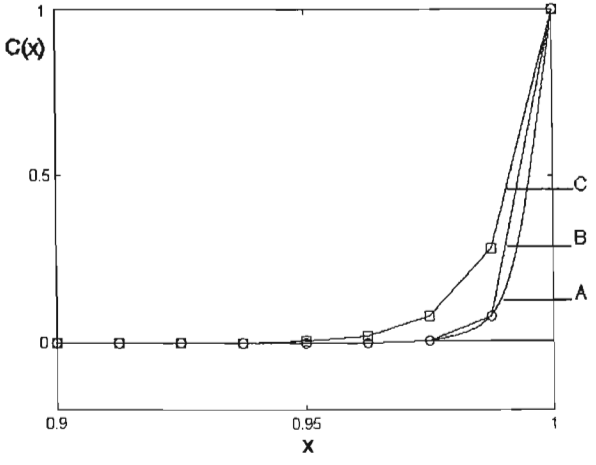

Figura 8: Comparación de la solución numérica del problema de Advección-Difusión con ($D = \frac{1}{200}$), línea C solución utilizando la difusión artificial (*upwind*), línea B solución considerando la difusión óptima (SG), y línea A es la solución analítica. Se utlizó el caso de $\mathbb{P}_e = 1.25$.

La figura 8 muestra la comparación entre el método *upwind* y el método Scharfetter-Gummel, donde se puede notar una mejor aproximación utilizan-

do el método Scharfetter-Gummel. Los valores del término advectivo y difusivo son v= 1 y $D = \frac{1}{200}$; el tamaño de h es 0.0125. Para hallar esta solución se hizo el programa de cómputo número 3 que está detallado en el apéndice A.

Denotemos a $\phi^C(t)$, $\phi^{UP}(t)$, $\phi^{SC}(t)$, como las funciones apropiadas para el esquema de diferencias finitas centrada, *upwind* y Scharfetter-Gummel - respectivamente. Notemos que la función $\phi^{SG}(t)$ correspondiente al esquema Scharfetter-Gummel se aproxima a la función $\phi^{UP}(t)$ *upwind* cuando $t \to \infty$; es decir,

$$\lim_{t\to\infty} \phi^{SG}(t) = \lim_{t\to\infty} t - 1 + \frac{2t}{e^{2t}-1} \simeq t \tag{6.22}$$

o equivalentemente

$$\phi^{SG}(t) \simeq \phi^{UP}(t). \tag{6.23}$$

Mientras que el orden del error de $\phi^{SG}(t)$ *es* igual a $O(h^2)$, el de $\phi^{UP}(t)$ es $O(h)$, si $\mathbb{P}_e \to 0$; ver [9], es decir, el error de discretización para la función Scharfetter-Gummel es de segundo orden de exactitud con respecto a h y para el método *upwind* es de orden uno. Por esta razón ésta es una *difusión óptima.*

El nuevo número local de Péclet asociado con el esquema (6.11) es definido como

$$\mathbb{P}_e^* = \frac{|\,v\,|}{2D_h} h = \frac{\mathbb{P}_e}{(1+\phi(\mathbb{P}_e))}, \tag{6.24}$$

en donde para los esquemas *upwind* y Scharfetter-Gummel (SG) el número local de Péclet, $\mathbb{P}_e^* < 1$, para cualquier valor de h.

Con estos dos esquemas de diferencias finitas se ha eliminado el problema que surgió con elemento finito para las oscilaciones alrededor de la solución analítica del problema de transporte, ecuación (4.1). Con el esquema Scharfetter-Gummel hemos encontrado una *difusión óptima* que nos permite que la solución numérica sea más precisa.

Considerando que la solución es estable y tomando en cuenta los dos esquemas, *upwind* y Scharfetter-Gummel (SG); en el siguiente capítulo se plantea la solución de la ecuación (4.1) con el método de elemento finito para lo cual se considerarán funciones de grado uno y dos. Esto será visto con mayor detalle en el siguiente capítulo.

7. Elemento Finito Estabilizado

La Difusión Artificial introducida en la sección 6.3 para Diferencias Finitas, la emplearemos en el Método Galerkin de Elemento Finito, es decir, se hace un desarrollo semejante al de la sección 4.22 usando la *difusión artificial* para obtener la solución con éste término de estabilidad. Para concluir esta técnica de diferencias finitas, se demostrará que al usar la *difusión* obtenida con los esquemas *upwind* y Scharfetter-Gummel (SG), la solución hallada con Elemento Finito converge para funciones base de grado $k = 1$ y 2. En la demostración se usarán ecuaciones que se encuentran contenidas en el apéndice B.

7.1. Análisis de la Difusión Artificial

Consideremos nuestro problema de Advección-Difusión dado por la ecuación

$$-Dc''(x) + \mathrm{v}c'(x) = 0 \quad \forall\ x \in [0,1];$$

regresando al análisis de la *difusión artificial* introducida para diferencias finitas en la sección (6.3), tenemos la ecuación de la siguiente forma

$$-D_h c''(x) + \mathrm{v}c'(x) = 0$$

sustituyendo $D_h = D(1 + \phi(\mathbb{P}_e))$, obtenemos la ecuación

$$(D + D\phi(\mathbb{P}_e))c''(x) + \mathrm{v}c'(x) = 0 \tag{7.1}$$

utilizando el desarrollo hecho para hallar la solución por Elemento Finito de la sección (6.1), Pag. 36, se tiene

$$\int_0^1 \left[-\left[D + D\phi(\mathbb{P}_e)\right] c''(x) + \mathrm{v}c'(x) \right] \phi_i(x)dx =$$

$$\int_0^1 \left[Dc'(x)\phi_i'(x) + \mathrm{v}c'(x)\phi_i(x) + D\phi(\mathbb{P}_e)c'(x)\phi_i'(x) \right] dx = 0. \tag{7.2}$$

Considerando la ecuación anterior como suma de 2 integrales obtenemos

$$\int_0^1 Dc'(x)\phi_i'(x) + \mathrm{v}c'(x)\phi_i(x)dx + \int_0^1 D\phi(\mathbb{P}_e)c'(x)\phi_i'(x)dx = 0$$

donde

$$\int_0^1 D\phi(\mathbb{P}_e)c'(x)\phi_i'(x)dx \tag{7.3}$$

es llamado el *término de estabilización* para Elemento Finito.

Para analizar el comportamiento de la solución numérica de elemento finito con el término de estabilización, se utilizará la ecuación *lineal* en *diferencias,* ecuación (6.1), hallada con Elemento Finito en la sección (6.1), a la cual se le sustituirá el término difusivo por la *difusión artificial* hallada con Diferencias Finitas, esto es, dada la siguiente ecuación

$$\left(\frac{\mathrm{v}h}{2D} - 1\right)c_{i+1} + 2c_i - \left(\frac{\mathrm{v}h}{2D} + 1\right)c_{i-1} = 0$$

hacemos una sutitución; sea $D_h = D$ entonces la ecuación anterior se convierte en

$$\left(\frac{\mathrm{v}h}{2D_h} - 1\right)c_{i+1} + 2c_i - \left(\frac{\mathrm{v}h}{2D_h} + 1\right)c_{i-1} = 0 \tag{7.4}$$

sustituyendo el valor de $D_h = D\left[1 + \phi(\mathbb{P}_e)\right]$ tenemos

$$\left(\frac{\mathrm{v}h}{2D\left[1 + \phi(\mathbb{P}_e)\right]} - 1\right)c_{i+1} + 2c_i - \left(\frac{\mathrm{v}h}{2D\left(1 + \phi(\mathbb{P}_e)\right)} + 1\right)c_{i-1} = 0$$

reagrupando los coeficientes del primer y tercer sumando se obtiene

$$\left(\frac{\mathrm{v}h}{2D}\frac{1}{\left[1 + \phi(\mathbb{P}_e)\right]} - 1\right)c_{i+1} + 2c_i - \left(\frac{\mathrm{v}h}{2D}\frac{1}{\left[1 + \phi(\mathbb{P}_e)\right]} + 1\right)c_{i-1} = 0 \tag{7.5}$$

sustituyendo el número local de Péclet, entonces la ecuación anterior se reduce a

$$\left(\frac{\mathbb{P}_e}{\left[1 + \phi(\mathbb{P}_e)\right]} - 1\right)c_{i+1} + 2c_i - \left(\frac{\mathbb{P}_e}{\left[1 + \phi(\mathbb{P}_e)\right]} + 1\right)c_{i-1} = 0 \tag{7.6}$$

la cual, como se vio en el capítulo (6), es una ecuación *lineal* en *diferencias* de orden 2 con coeficientes constantes de la siguiente forma

$$\left(\frac{\mathbb{P}_e}{[1+\phi(\mathbb{P}_e)]}-1\right)\rho^2+2\rho-\left(\frac{\mathbb{P}_e}{[1+\phi(\mathbb{P}_e)]}+1\right)=0,$$

cuyas raices son

$$\rho_{1,2}=\begin{cases}\frac{\mathbb{P}_e}{[1+\phi(\mathbb{P}_e)]}\\ 1\end{cases}$$

y cuya solución es

$$c_i=1-\left(\frac{1+\frac{\mathbb{P}_e}{[1+\phi(\mathbb{P}_e)]}}{1-\frac{\mathbb{P}_e}{[1+\phi(\mathbb{P}_e)]}}\right)^i\Bigg/1-\left(\frac{1+\frac{\mathbb{P}_e}{[1+\phi(\mathbb{P}_e)]}}{1-\frac{\mathbb{P}_e}{[1+\phi(\mathbb{P}_e)]}}\right)^E \tag{7.7}$$

$\forall i=0,1,2,....,E.$

De la ecuación anterior se analizarán tres casos para la función que depende del número local de Péclet, estos casos se explican a continuación

1 Si $\phi(\mathbb{P}_e)=0$, entonces evaluando en la solución (7.7), se tiene

$$c_i=1-\left(\frac{1+\mathbb{P}_e}{1-\mathbb{P}_e}\right)^i\Bigg/1-\left(\frac{1+\mathbb{P}_e}{1-\mathbb{P}_e}\right)^E$$

$\forall i=0,1,2,....,E$, que es la solución que fue hallada con elemento finito en donde existen problemas de oscilaciones para un número de Péclet mayor a uno.

2 Si $\phi(\mathbb{P}_e)=\mathbb{P}_e$, al considerar está igualdad se hace uso de la difusión artificial *upwind*, sustituyendo en la solución (7.7), ésta se convierte en

$$\begin{aligned}c_i &= 1-\left(\frac{1+\frac{\mathbb{P}_e}{1+\mathbb{P}_e}}{1-\frac{\mathbb{P}_e}{1+\mathbb{P}_e}}\right)^i\Bigg/1-\left(\frac{1+\frac{\mathbb{P}_e}{1+\mathbb{P}_e}}{1-\frac{\mathbb{P}_e}{1+\mathbb{P}_e}}\right)^E=\\ &1-\left(\frac{\frac{1+2\mathbb{P}_e}{1+\mathbb{P}_e}}{\frac{1}{1+\mathbb{P}_e}}\right)^i\Bigg/1-\left(\frac{\frac{1+2\mathbf{P}_e}{1+\mathbf{P}_e}}{\frac{1}{1+\mathbf{P}_e}}\right)^E\end{aligned}$$

por lo tanto

$$c_i = \frac{1-(1+2\mathbb{P}_e)^i}{1-(1+2\mathbb{P}_e)^E} \tag{7.8}$$

$\forall i = 0, 1, 2, ..., E.$

Para analizar su comportamiento, notemos de la ecuación (4.17) del método de elemento finito que al sustituir el término difusivo por la difusión artificial, obtenemos la misma solución que fue hallada con diferencias finitas usando el esquema *upwind*, por lo tanto el comportamiento para elemento finito usando el esquema *upwind* es estable para diferentes valores del número de Péclet.

3 Si $\phi(\mathbb{P}_e) = \mathbb{P}_e - 1 + \frac{2\mathbb{P}_e}{e^{2\mathbb{P}_e}-1}$, caso en el cual se utiliza la *difusión óptima* que fue hallada con el esquema Scharfetter-Gummel, entonces al sustituir en la solución (7.7) se obtiene

$$c_i = 1 - \left(\frac{1 + \frac{\mathbb{P}_e}{1+\mathbb{P}_e-1+\frac{2\mathbb{P}_e}{e^{2\mathbb{P}_e}-1}}}{1 - \frac{\mathbb{P}_e}{1+\mathbb{P}_e-1+\frac{2\mathbb{P}_e}{e^{2\mathbb{P}_e}-1}}} \right)^i \Bigg/ 1 - \left(\frac{1 + \frac{\mathbb{P}_e}{1+\mathbb{P}_e-1+\frac{2\mathbb{P}_e}{e^{2\mathbb{P}_e}-1}}}{1 - \frac{\mathbb{P}_e}{1+\mathbb{P}_e-1+\frac{2\mathbb{P}_e}{e^{2\mathbb{P}_e}-1}}} \right)^E$$

haciendo los cálculos de los términos que aparecen en la ecuación anterior obtenemos que

$$c_i = \frac{1-\left(e^{2\mathbb{P}_e}\right)^i}{1-\left(e^{2\mathbb{P}_e}\right)^E}$$

utilizando la definición del número local de Péclet se obtiene

$$c_i = \frac{e^{vhi/D}-1}{e^{vhE/D}-1} \tag{7.9}$$

$\forall i = 0, 1, 2, ..., E$, que es la misma solución que fue hallada con el método analítico; sólo que aquí está evaluada en los nodos de la partición.

Por lo tanto con la *difusión óptima* se ha encontrado una solución numérica la cual es nodalmente exacta utilizando el Método de Elemento Finito.

7.2. Convergencia de la Solución Numérica

Para demostrar la convergencia del Método de Elemento Finito con funciones base de grado $k = 1, 2$; usaremos el resultado del Método Galerkin que indica que existe estabilidad; para ello consideremos la función aproximada de la siguiente forma

$$\hat{c}(x) = c_F(x) + \sum_{j=1}^{E-1} c_j \phi_j(x)$$

donde $c_F(x)$ una función en la cual los valores en la frontera del dominio son esenciales para la construcción de una solución aproximada $\hat{c}(x)$ y que debe satisfacer las condiciones de frontera impuestas sobre $c(x)$. Es decir

$$c_F(x) = (1 - x)c_0 + xc_E \quad \text{con } x \in [0, 1]$$

es una linea recta que interpola los datos de frontera, ahora el espacio de funciones es de grado $k \geq 1$; despejando la función aproximada tenemos

$$\sum_{j=1}^{E-1} c_j \phi_j(x) = \hat{c}(x) - c_F(x).$$

Sea

$$c_H = \sum_{j=1}^{E-1} c_j \phi_j(x) \tag{7.10}$$

el problema modificado es encontrar c_H tal que c_H pertenece a un espacio de polinomios de grado $k \geq 1$. Sea X_h^k un espacio de polinomios de dimensión finita.

Considerando la forma bilineal (4.15), tenemos que encontrar c_H, para ello vemos como es $a(c_H, \phi_i(x))$, que se expresa como

$$a(c_H, \phi_i(x)) = a(\hat{c}(x) - c_F(x), \phi_i(x)), \tag{7.11}$$

usando la linealidad de $a(\cdot, \cdot)$, obtenemos

$$a(c_H, \phi_i(x)) = a(\hat{c}(x), \phi_i(x)) - a(c_F(x), \phi_i(x)),$$

teniendo en cuenta que $\hat{c}(x)$ es la solución aproximada y usando la ecuación (4.14) se tiene que

$$a(c_H, \phi_i(x)) = -a(c_F(x), \phi_i(x)) \tag{7.12}$$

sustituyendo $c_F(x) = x$, se desarrolla la forma bilineal de el término derecho obteniendo

$$-a(x, \phi_i(x)) = -\int_0^1 Dx^{'}\phi_i^{'}(x) + \mathrm{v}x^{'}\phi_i(x)dx =$$

$$-\int_0^1 \mathrm{v}\phi_i(x)dx \tag{7.13}$$

para todo $\phi_i(x)$ que pertenece al espacio de polinomios X_h^k de grado $k \geq 1$. Aquí hemos usado el hecho que $\phi_i(x) = 0$ en la frontera, entonces tenemos que

$$a(c_H, \phi_i(x)) = -\int_0^1 \mathrm{v}\phi_i(x)dx. \tag{7.14}$$

Considerando el Método Galerkin, nuestro problema se resume diciendo que debemos hallar $c_H^h \in X_h^k$, tal que

$$a_h(c_H^h, \phi_h(x)) = -\int_0^1 \mathrm{v}\phi_h(x)dx, \tag{7.15}$$

donde

$$a_h(c, \phi_i(x)) = a(c, \phi_i(x) + b(c, \phi_i(x)) \tag{7.16}$$

tal que

$$a(c, \phi_i(x)) = \int_0^1 Dc^{'}(x)\phi_i^{'}(x) + \mathrm{v}c^{'}(x)\phi_i(x)dx$$

que es la forma bilineal (4.14), del capítulo 4 y

$$b(c, \phi_i(x) = D\phi(\mathbb{P}_e)\int_0^1 c^{'}(x)\phi_i^{'}(x)dx.$$

Definición 8 *El espacio de Sobolev $H^m(0,1)$, m=1,2,... consiste de todas las funciones $\phi \in L^2(0,1)$ tal que $\frac{d^\alpha \phi}{dx^\alpha}$ existe para cada α, tal que $|\alpha| \leq m$.*

Sea $H_0^1(0,1) = \left\{ \phi \in L^2(0,1) : \phi' \in L^2(0,1),\ \phi(0) = \phi(1) = 0 \right\}$, ahora por el método Galerkin, existe estabilidad ver [7], entonces el término correspondiente a la velocidad v, puede tener cualquier valor numérico, en este caso lo tomaremos idénticamente cero, esto es v= 0. Entonces

$$\begin{aligned} a_h(\phi(x), \phi(x)) &= \int_0^1 D\phi'(x)\phi'(x)dx + D\phi(\mathbb{P}_e) \int_0^1 \phi'(x)\phi'(x)dx \quad (7.17) \\ &= (D + D\phi(\mathbb{P}_e)) \int_0^1 \phi'(x)\phi'(x)dx = D_h |\phi|^2_{H^1(0,1)} \end{aligned}$$

$\forall \phi \in H^1(0,1)$, donde se usa la norma

$$| \phi(x) |_{H^1(0,1)} = \left(\int_0^1 \left| \phi'(x) \right|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}, \qquad (7.18)$$

nótese que $\frac{D_h}{D} = (1 + \phi(\mathbb{P}_e)) \geq 1$.

Para probar la convergencia de la solución numérica c_H^h con respecto a la solución exacta c_H, consideremos a c_H^h dependiente de h; es decir, queremos demostrar que c_H^h tiende a c_H cuando h tiende a cero.

Teorema 9 *Si $k = 1$ entonces*

$$\left| c_H - c_H^h \right|_{H^1(0,1)} \leq ChG(c_H) \qquad (7.19)$$

donde C es una constante conveniente e independiente de h y de c_H, y

$$G(c_H) = \begin{cases} |c_H|_{H^1(0,1)} + |c_H|_{H^2(0,1)} & \text{para el método upwind} \\ |c_H|_{H^2(0,1)} & \text{para el método } SG. \end{cases}$$

Además si $k = 2$ el método SG da el error estimado mejorado
$\left| c_H - c_H^h \right|_{H^1(0,1)} \leq Ch^2 \left(|c_H|_{H^1(0,1)} + |c_H|_{H^3(0,1)} \right)$.

Demostración.

Para el caso $k = 1$.

De la expresión (7.14) tenemos que

$$a\left(c_H, \phi_h\right) = -\int_0^1 \mathrm{v}\phi_h dx$$

y por comparación con la relación (7.16) se tiene que

$$a_h\left(c_H - c_H^h, \phi_h\right) = b\left(c_H, \phi_h\right). \tag{7.20}$$

Denotemos por

$$E_h = c_H - c_{Hh}^h \tag{7.21}$$

el error de discretización. El espacio $H^1(0,1)$ lo dotamos con la norma

$$\mid \phi(x) \mid_{H^1(0,1)} = \left(\int_0^1 \left|\phi'(x)\right|^2 dx\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{7.22}$$

y donde

$$D_h \mid E_h \mid^2_{H^1(0,1)} = a_h(E_h, E_h). \tag{7.23}$$

Considerando el interpolante, ver (corolario, apéndice B), de la solución c_H y usando la linealidad de $a_h(\cdot,\cdot)$ tenemos

$$a_h\left(E_h, E_h\right) = a_h\left(E_h, c_H - \Pi_h^k c_H\right) + a_h\left(E_h, \Pi_h^k c_H - c_H^h\right) \tag{7.24}$$

considerando la igualdad (7.20), con $\phi_h = \Pi_h^k c_H - c_H^h$ obtenemos

$$D_h \mid E_h \mid^2_{H^1(0,1)} = a_h\left(E_h, c_H - \Pi_h^k c_H\right) + b\left(c_H, \Pi_h^k c_H - c_H^h\right)$$

desarrollando el lado derecho de la igualdad anterior tenemos

$$a_h\left(E_h, c_H - \Pi_h^k c_H\right) + b\left(c_H, \Pi_h^k c_H - c_H^h\right) =$$

$$\int_0^1 D_h E_h'\left(c_H - \Pi_h^k c_H\right)' + \mathrm{v}E_h'\left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) dx + D\phi(\mathbb{P}_e) \int_0^1 c_H'\left(\Pi_h^k c_H - c_H^h\right)' dx$$

usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz y la constante de Poincaré; ecuaciones (8.4) y (8.5) del apéndice B, se tiene

$$D_h |E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq D_h |E_h|_{H^1(0,1)} \left| \left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) \right|_{H^1(0,1)} +$$

$$|\mathrm{v}| \, C_p \, |E_h|_{H^1(0,1)} \left| \left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) \right|_{H^1(0,1)} + D\phi(\mathbb{P}_e) \int_0^1 c_H' \left(\Pi_h^k c_H - c_H^h\right)' dx.$$

Sea $M_h = D_h + C_p \, |\mathrm{v}|$ entonces

$$D_h \, |E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq M_h \left(|E_h|_{H^1(0,1)} \left| \left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) \right|_{H^1(0,1)} \right) + \tag{7.25}$$

$$D\phi(\mathbb{P}_e) \int_0^1 c_H' \left(\Pi_h^k c_H - c_H^h\right)' dx$$

nótese que si $k = 1$, corresponde al esquema de elemento finito lineal por tramos y $\phi(\mathbb{P}_e) = \phi^{SG}$ (SG difusión óptima) la cantidad de la integral es identicamente cero si $c_H^h = \Pi_h^k c_H$; ya que la solución exacta es igual a la aproximada en los nodos. Entonces la desigualdad anterior se convierte en

$$D_h \, |E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq M_h \left(|E_h|_{H^1(0,1)} \left| \left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) \right|_{H^1(0,1)} \right)$$

despejando $|E_h|_{H^1(0,1)}$, tenemos

$$|E_h|_{H^1(0,1)} \leq \frac{M_h}{D_h} \left| \left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) \right|_{H^1(0,1)}$$

y como $D_h \geq D$, entonces considerando la constante M_h se tiene

$$\left(1 + C_p \frac{|\mathrm{v}|}{D_h}\right) \left| \left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) \right|_{H^1(0,1)} \leq \left(1 + C_p \frac{|\mathrm{v}|}{D}\right) \left| \left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) \right|_{H^1(0,1)}$$

entonces

$$|E_h|_{H^1(0,1)} \leq \left(1 + C_p \frac{|\mathrm{v}|}{D}\right) \left| \left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) \right|_{H^1(0,1)},$$

ahora, utilizando el número global de Péclet y la interpolación estimada obtenemos

$$|E_h|_{H^1(0,1)} \leq Ch \left(1 + 2\mathbb{P}_{e_{gl}} C_p\right) |c_H|_{H^2(0,1)}$$

por lo tanto hemos demostrado que el error está acotado, es decir, c_H^h tiende a c_H cuando h tiende a cero utilizando polinomios de grado $k = 1$, más la *difusión artificial* óptima del esquema (SG).

Para el caso en el cual se utilizará el esquema *upwind*, partiremos de la desigualdad (7.25) la cual puede ser manipulada, para ello consideremos la igualdad (7.21), la desigualdad de Cauchy ecuación (8.5) del apéndice B, y la desigualdad del triángulo, entones se tiene que para la integral del lado derecho de (7.25)

$$\int_0^1 c_H^{'} \left(\Pi_h^k c_H - (c_H - E_h)\right)^{'} dx = \int_0^1 c_H^{'} \left(\Pi_h^k c_H - c_H + E_h\right)^{'} dx =$$

$$\int_0^1 c_H^{'} \left(\Pi_h^k c_H - c_H\right)^{'} + c_H^{'} E_h^{'} dx \leq \int_0^1 \left| c_H^{'} \left(\Pi_h^k c_H - c_H\right)^{'} \right| + \left| c_H^{'} E_h^{'} \right| dx$$

usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz ecuación (8.5) del apéndice B, el término derecho de la desigualdad anterior

$$\int_0^1 \left| c_H^{'} \left(\Pi_h^k c_H - c_H\right)^{'} \right| + \left| c_H^{'} E_h^{'} \right| dx \leq$$

$$|c_H|_{H^1(0,1)} \left|\Pi_h^k c_H - c_H\right|_{H^1(0,1)} + |c_H|_{H^1(0,1)} |E_h|_{H^1(0,1)}$$

$$= |c_H|_{H^1(0,1)} \left(\left|\Pi_h^k c_H - c_H\right|_{H^1(0,1)} + |E_h|_{H^1(0,1)} \right)$$

sustituyendo en (7.25) tenemos

$$D_h |E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq |E_h|_{H^1(0,1)} \left(M_h \left| \left(c_H - \Pi_h^k c_H\right) \right|_{H^1(0,1)} \right) +$$

$$|E_h|_{H^1(0,1)} \left(D\phi(\mathbb{P}_e) |c_H|_{H^1(0,1)} \right) + D\phi(\mathbb{P}_e) |c_H|_{H^1(0,1)} \left| (c_H - \Pi_h^k c_H) \right|_{H^1(0,1)}$$

usando la interpolación estimada, ecuación (8.6) del apéndice B, la desigualdad anterior se convierte en

$$D_h |E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq |E_h|_{H^1(0,1)} \left(M_h C h^k |c_H|_{H^{k+1}(0,1)} \right) +$$

$$|E_h|_{H^1(0,1)} \left(D\phi(\mathbb{P}_e)\,|c_H|_{H^1(0,1)} \right) + C\,D\phi(\mathbb{P}_e)\,|c_H|_{H^1(0,1)}\, h^k\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)}\,;$$

entonces aplicando la desigualdad de Young, ver (apéndice B), sea

$$\varepsilon = \frac{D_h}{4} > 0$$

y

$$\begin{aligned} a &= |E_h|_{H^1(0,1)} \\ b &= M_h C h^k\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)}\ ,\ D\phi(\mathbb{P}_e)|c_H|_{H^1(0,1)}\,, \end{aligned}$$

entonces tenemos

$$D_h\,|E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq \frac{D_h}{2}\,|E_h|^2_{H^1(0,1)} + \frac{\left(M_h C h^k\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)}\right)^2}{D_h} +$$

$$\frac{\left(D\phi(\mathbb{P}_e)\,|c_H|_{H^1(0,1)}\right)^2}{D_h} + C D\phi(\mathbb{P}_e)\,|c_H|_{H^1(0,1)}\, h^k\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)}$$

sumando términos iguales y elevando al cuadrado los términos dentro del paréntesis obtenemos

$$\frac{D_h}{2}\,|E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq \frac{M_h^2}{D_h} C^2 h^{2k}\,|c_H|^2_{H^{k+1}(0,1)} + \frac{D^2}{D_h}\phi^2(\mathbb{P}_e)\,|c_H|^2_{H^1(0,1)} +$$

$$C D\phi(\mathbb{P}_e)\,|c_H|_{H^1(0,1)}\, h^k\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)}$$

de aquí se sigue que

$$|\ E_h\ |^2_{H^1(0,1)} \leq \left(\frac{M_h}{D_h}\right)^2 2C^2 h^{2k}\,|c_H|^2_{H^{k+1}(0,1)} + \left(\frac{D}{D_h}\right)^2 2\phi^2(\mathbb{P}_e)\,|c_H|^2_{H^1(0,1)} +$$

$$2\frac{D}{D_h}\phi(\mathbb{P}_e)\,|c_H|_{H^1(0,1)}\, C h^k\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)}\,.$$

Como $D_h > D$ entonces

$$\left(\frac{M_h}{D_h}\right)^2 < \left(\frac{M_h}{D}\right)^2$$

y usando la definición del número de global Péclet entonces la desigualdad anterior se convierte en

$$|E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq 2C^2h^{2k}\left(1+2\mathbb{P}_{e_{gl}}C_p\right)^2|c_H|^2_{H^{k+1}(0,1)} +$$

$$2\phi(\mathbb{P}_e)\,|c_H|_{H^1(0,1)}\,Ch^k\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)} + 2\phi(\mathbb{P}_e)^2\,|c_H|^2_{H^1(0,1)}.$$

Consideremos una constante $M > 0$ tal que

$$|E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq M\left[h^{2k}\,|c_H|^2_{H^{k+1}(0,1)} +\right.$$

$$\left.\phi(\mathbb{P}_e)\,|c_H|_{H^1(0,1)}\,h^k\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)} + \phi(\mathbb{P}_e)^2\,|c_H|^2_{H^1(0,1)}\right];$$

si $\phi^{UP} = \frac{\mathrm{v}}{2D}h$; es decir, $\phi^{UP} = \mathbb{P}_e$ entonces tenemos que

$$|E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq M\left[h^{2k}|c_H|^2_{H^{k+1}(0,1)} + \frac{\mathrm{v}}{2D}h^{k+1}\,|c_H|_{H^1(0,1)}\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)} +\right.$$

$$\left.\left(\frac{\mathrm{v}}{2D}\right)^2 h^2\,|c_H|^2_{H^1(0,1)}\right]$$

factorizando h^2 del lado derecho y considerando una constante C tal que $C = \mathrm{Max}\left\{M,\ M\left(\frac{\mathrm{v}}{2D}\right),\ M\left(\frac{\mathrm{v}}{D}\right)^2\right\}$ tenemos que

$$|E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq Ch^2\left[h^{2k-2}\,|c_H|^2_{H^{k+1}(0,1)} +\right.$$

$$\left.h^{k-1}\,|c_H|_{H^1(0,1)}\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)} + |c_H|^2_{H^1(0,1)}\right]$$

el cual muestra que usando elementos finito lineales; es decir, $k = 1$, más la difusión artificial *upwind* obtenemos la convergencia lineal estimada (7.19).

Consideremos el caso en que $\phi = \phi^{SG}$, asumiendo que para alguna h suficientemente pequeña $\phi^{SG} \leq Kh^2$, para alguna constante K positiva; entonces tenemos

$$|E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq M\left[h^{2k}\,|c_H|^2_{H^{k+1}(0,1)} +\right.$$

$$\left.\phi^{SG}\,|c_H|_{H^1(0,1)}\,h^k\,|c_H|_{H^{k+1}(0,1)} + \left(\phi^{SG}\right)^2|c_H|^2_{H^1(0,1)}\right]$$

usando que ϕ^{SG} está acotada, entonces

$$|E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq M \left[h^{2k} |c_H|^2_{H^{k-1}(0,1)} + \right.$$

$$\left. K |c_H|_{H^1(0,1)} h^{k+2} |c_H|_{H^{k+1}(0,1)} + K^2 h^4 |c_H|^2_{H^1(0,1)} \right]$$

factorizando h^2 y para una constante C tenemos

$$|E_h|^2_{H^1(0,1)} \leq C h^4 \left[h^{2(k-2)} |c_H|^2_{H^{k+1}(0,1)} + \right.$$

$$\left. |c_H|_{H^1(0,1)} h^{k-2} |c_H|_{H^{k+1}(0,1)} + |c_H|^2_{H^1(0,1)} \right]$$

lo cual muestra que usando elementos finitos cuadraticos; es decir, $k = 2$, más la difusión artificial óptima obtenemos la convergencia estimada de segundo orden. ■

Así, la técnica hallada con Diferencias Finitas para evitar los problemas de oscilaciones en la solución numérica de la ecuación Advección-difusión, se pudo emplear en el Método de Elemento Finito considerando polinomios de grado $k = 1$ y $k = 2$, además se demostró que existe convergencia de la solución aproximada a la solución exacta cuando el tamaño de la partición tiende a cero para los dos esquemas *upwind* y Scharfetter-Gummel.

8. Comentarios Finales

Los comentarios a este trabajo son los siguientes.

- Uno de los problemas que enfrenta el hombre hoy en día es la Contaminación del Medio Ambiente. Una forma de hallar solución a estos problemas es haciendo uso de las herramientas matemáticas para obtener un modelo que describa el transporte advectivo-difusivo de contaminantes.

- La formulación de los Sistemas Continuos es una herramienta poderosa para plantear los modelos de sistemas que son de gran interés para el hombre ya que de esta forma se hace uso correcto de los recursos naturales y se prevé desastres en el Medio Ambiente.

- El plantear el modelo matemático del Transporte Difusivo de Contaminantes nos conduce a tener una ecuación diferencial parcial que gobierna este fenómeno. Como sabemos el modelo que gobierna el transporte depende de los términos advectivo y difusivo, la dificultad que se encontró fue que al obtener la solución numérica utilizando ecuaciones *lineales* en *diferencias* para los métodos FEM y DF ocurrian oscilaciones de la solución y esto fue consecuencia de un número local de Péclet mayor que uno.

  Dadas las variantes que ofrece el Método de Diferencias Finitas se utiliza una de ellas para evitar las oscilaciones; como primera instancia se considera el método *upwind* con el cual se introduce una *difusión artificial* y esto ocasiona que la solución numérica del pro-blema original obtenga estabilidad, pero el precio que se paga es una perdidad de exactitud ya que el método *upwind* introduce un error de discretización de orden $O(h)$.

  Debido a ello consideramos una combinación entre diferencias finitas *centradas* y diferencias *hacia atrás* aproximando la primera derivada y

hacemos uso de un resultado para que la solución numérica sea exactamente igual al valor de la solución analítica evaluada en los nodos, este esquema obtenido es conocido como el Método Scharfetter-Gummel. Con ello decimos que hemos obtenido una difusión óptima y además con este esquema el orden del error de discretización es $O(h^2)$.

- El tener una difusión óptima y saber que el esquema propuesto disfruta de estabilidad y un error de convergencia suficientemente bueno, nos llevó a implementarlo al Método de Elemento Finito considerando funciones de grado 1 y 2, para ello se demostró que existe convergencia de la solución numérica tanto para el método *upwind* como para esquema hallado con el Método Scharfetter-Gummel.

- Por lo tanto, podemos decir que para la solución numérica del problema de transporte de solutos en fluidos libres hemos hallado una técnica para evitar las oscilaciones que ocurren cuando existen velocidades altas, sin importar que tan grande pueda ser el número local de Péclet.

9. Apéndice A

A continuación se detalla el código de cada uno de los programas en los cuales se ilustra la importancia del número de Péclet en la solución numérica de la ecuación que gobierna el transporte de solutos en fluidos libres.

El programa 1 muestra los problemas de oscilaciones para valores del Número de Péclet mayores que uno

Nota: en todos los programas el resultado se da en términos se U´s, considere

$$c_i = U_i \quad \forall\, i = 1, 2, ..., E-1$$

9.1. Programa 1

Este programa resuelve la ecuación de transporte, la solución es obtenida por el Método de Diferencias Finitas centradas, ilustrando las oscilaciones que ocurren para diferentes valores del Número de Péclet.

Consideremos la ecuación:

$$-Dc^{''}(x) + \mathrm{v}c^{'}(x) = 0 \;\; \forall\, x \in [0, L]$$

con condiciones de frontera $c(0) = 0$ y $c(L) = 1$.

En este programa se hacen 3 particiones del dominio 20, 40 y 80 elementos, para así mostrar tres soluciones al problema considerando el número local de Péclet. El valor de los términos advectivo y difusivo están dados en los datos iniciales del programa.

Programa

```
%DATOS INICIALES
L=1              % Longitud del intervalo
E=21             % Número de Nodos
n =E-1           % Número de elementos
h=L/n            % Tamaño del elemento ( partición uniforme)
D=1.0520         % Término Difusivo
```

```
V=110.67          % Término Advectivo
uI=0              % valor en la frontera inicial
uF=1              % valor de u en la frontera final
Pe=(V/(2*D))*h % Número local de Péclet
```

% CÁCULO DE LA MATRIZ A Y EL VECTOR b QUE REPRESENTA EL SISTEMA DE ECUACIONES

```
A=zeros(E-2);
b=zeros([E-2,1]);
A(1,1) = (2*D)*1/h^2;
A(1,2)=(-D + 0.5*(V*h))*1/h^2;
  for i=2:E-3,
    A(i,i-1)=(-D-0.5*(V*h))*1/h^2;
    A(i,i) = (2*D)*1/h^2;
    A(i,i+1)=(-D + 0.5*(V*h))*1/h^2;
    b(i,1)= (1/h^2 +V/(2*h))*uI;
  end
% Entradas penúltimas de la matriz A y vector b
A(E-2 ,E-3)=(-D-0.5*(V*h))*(1/h^2);
A(E-2,E-2) = (2*D)*(1/h^2);
b(E-2,1)= (D/h^2-V/(2*h))*uF;
% Matriz inversa
C=inv(A);
% Valores de u´s interiores
u=C*b;
%U totales
U1=[0;u;1];
% Partición del intervalo [0,L],para E=21
x1=zeros([E,1]);
for r=1:E,
x1(r,1)=(r-1)*h;
```

```
end
clear A;
clear b;
clear C;
clear u;
clear E;
clear Pe;
clear h;

-----------------------------------------------
E=41                % Número de nodos
n=E-1               % Número de elementos
h=L/n               % Tamaño del elemento ( partición uniforme)
Pe=(V/(2*D))*h      % Número de Péclet
```

% CÁLCULO DE LA MATRIZ A Y EL VECTOR b QUE REPRESENTA EL SISTEMA DE ECUACIONES

```
A=zeros(E-2);
b=zeros([E-2,1]);
A(1,1) = (2*D)*1/h^2;
A(1,2)=(-D + 0.5*(V*h))*1/h^2;
  for i=2:E-3,
    A(i,i-1)=(-D-0.5*(V*h))*1/h^2;
    A(i,i) = (2*D)*1/h^2;
    A(i,i+1)=(-D + 0.5*(V*h))*1/h^2;
    b(i,1)= (1/h^2 +V/(2*h))*uI;
  end
% Entradas penúltimas de la matriz A y vector b
  A(E-2,E-3)=(-D-0.5*(V*h))*1/h^2;
  A(E-2,E-2) = (2*D)*1/h^2;
  b(E-2,1)= (D/h^2-V/(2*h))*uF;
```

```
% Matriz inversa
  C=inv(A);
% Valores de u´s interiores
  u=C*b;
% U totales
  U2=[0;u;1];
% Partición del intervalo [0,L], para E=41
  x2=zeros([E,1]);
  for r=1:E,
    x2(r,1)=(r-1)*h;
  end
clear A;
clear b;
clear C;
clear u;
clear E;
clear Pe;
clear h;
```

```
E=81              % Número de nodos
n =E-1            % Número de elementos
h=L/n             % Tamaño del elemento ( partición uniforme)
Pe=(V/(2*D))*h    % Número de Péclet
```

% CÁLCULO DE LA MATRIZ A Y EL VECTOR b QUE REPRESENTA EL SISTEMA DE ECUACIONES

```
A=zeros(E-2);
b=zeros([E-2,1]);
A(1,1)=(2*D)*1/h^2;
A(1,2)=(-D + 0.5*(V*h))*1/h^2;
  for i=2:E-3,
```

```
    A(i,i-1)=(-D-0.5*(V*h))*1/h^2;
    A(i,i) = (2*D)*1/h^2;
    A(i,i+1)=(-D + 0.5*(V*h))*1/h^2;
    b(i,1)= (1/h^2 +V/(2*h))*uI;
  end
% Entradas penúltimas de la matriz A y vector b
  A(E-2,E-3)=(-D-0.5*(V*h))*1/h^2;
  A(E-2,E-2)= (2*D)*1/h^2;
  b(E-2,1)= (D/h^2-V/(2*h))*uF;
% Matriz inversa
  C=inv(A);
% Valores de u´s interiores
  u=C*b;
% U totales
  U3=[0;u;1];
% Partición del intervalo [0,L], para E=81
  x3=zeros([E,1]);
  for r=1:E,
    x3(r,1)=(r-1)*h;
  end
-----------------------------------------------------
% Cálculo de U1 interpolado
  U11=zeros(E,1);
  for j=1:E,
    for i=1:21,
      if x3(j,1) >= x1(i,1) & x3(j,1)<= x1(i+1,1)
      U11(j,1)=((x3(j,1)-x1(i+1,1))/(x1(i,1)-x1(i+1,1)))*U1(i,1) +
               ((x3(j,1)-x1(i,1))/(x1(i+1,1)-x1(i,1)))*U1(i+1,1) ;
    break;
      end
```

```
    end
  end
-------------------------------------------
% Cálculo de U2 interpolado
  U22=zeros(E,1);
  for j=1:E,
    for i=1:41,
      if x3(j,1) >= x2(i,1) & x3(j,1)<= x2(i+1,1)
      U22(j,1)=((x3(j,1)-x2(i+1,1))/(x2(i,1)-x2(i+1,1)))*U2(i,1) +
                ((x3(j,1)-x2(i,1))/(x2(i+1,1)-x2(i,1)))*U2(i+1,1) ;
    break;
      end
    end
  end
-------------------------------------------
% Solución exacta
  Y=(exp((V/D)*x3) -1)/(exp(V/D)-1);
% Gráfica (observación de las oscilaciones para diferentes números de Péclet)
    plot(x3,Y,'-',x3,U11,'--',x3,U22,'-..',x3,U3,'.-')
```

La gráfica de la solución para diferentes números de Péclet viene dada en la siguiente pag.

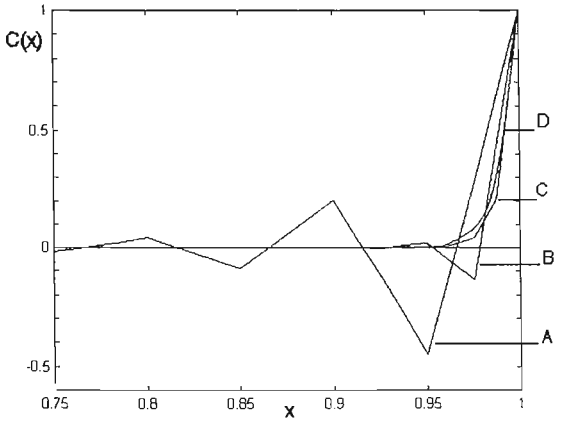

Figura 9: Solución en diferencias finitas centradas del problema de Advección-Difusión para diferentes valores del número de local de Péclet. Línea (A), $\mathbb{P}_e = 2.63$; línea (B), $\mathbb{P}_e = 1.28$; línea (C), $\mathbb{P}_e = 0.63$, línea (D) es la solución analítica.

9.2. Programa 2

Este programa resuelve la ecuación de transporte Advectivo-Difusivo, a la cual se le ha introducido la *Difusión Artificial* (da). Consideremos la ecuación

$$-D_h c^{''}(x) + \mathrm{v} c^{'}(x) = 0$$

con condiciones de frontera $c(0) = 0$ y $c(L) = 1$. El término de perturbación es

$$D_h = D(1 + \mathbb{P}_e)$$

en el programa D_h = da. En el programa 2 se introduce una variante del Metodo de Diferencias Finitas con el cual se nota un efecto de eliminación de oscilaciones, es decir se nota la estabilidad para el método *upwind* con respecto a la no estabilidad para diferencias finitas centradas.

En este programa, primero se hace una comparación entre diferencias finitas centradas y el método *upwind*, para una partición con 20 elementos. Despues se da la solución para una partición de 80 elementos sólo para el método *upwind*. Los valores de los términos advectivo y difusivo vienen en el programa.

Programa

```
% DATOS INICIALES
L=1                 % Longitud del intervalo
E=21                % Número de Nodos
n=E-1               % Número de elementos
h=L/n               % tamaño del elemento ( partición uniforme)
D=1/100             % Término Difusivo
V=1                 % Término Advectivo
uI=0                % Valor en la frontera inicial
uF=1                % Valor de u en la frontera final
Pe=(V/(2*D))*h      % Número de local Péclet
da=D*(1+Pe)         % Difusión Artificial
```

```
% CÁLCULO DE LA MATRIZ A Y EL VECTOR b PARA DIFERENCIAS FINITAS CENTRADAS
  A=zeros(E-2);
  b=zeros([E-2,1]);
  A(1,1)=(2*D)*1/h^2;
  A(1,2)=(-D + 0.5*(V*h))*1/h^2;
  b(1,1)=(D/h^2 +V/(2*h))*uI;
  for i=2:E-3,
    A(i,i-1)=(-D-0.5*(V*h))*1/h^2;
    A(i,i) = (2*D)*1/h^2;
    A(i,i+1)=(-D + 0.5*(V*h))*1/h^2;
    b(i,1)= (1/h^2 +V/(2*h))*uI;
  end
% Entradas penúltimas de la matriz y vector total
  A(E-2,E-3)=(-D-0.5*(V*h))*1/h^2;
  A(E-2,E-2) = (2*D)*1/h^2;
  b(E-2,1)= (D/h^2-V/(2*h))*uF;
% Matriz inversa
  C=inv(A);
% Valores de u´s interiores
  u=C*b;
% U totales
  U1=[0;u;1];
% Partición del intervalo [0,L]
  x1=zeros([E,1]);
  for r=1:E,
    x1(r,1)=(r-1)*h;
  end
clear A ;
clear C ;
```

```
clear b ;
clear u ;
% CÁLCULO DE LA MATRIZ A Y EL VECTOR b PARA EL MÉTODO UPWIND
  A=zeros(E-2);
  b=zeros([E-2,1]);
  A(1,1) = (2*da)*1/h^2;
  A(1,2)=(-da + 0.5*(V*h))*1/h^2;
  for i=2:E-3,
    A(i,i-1)=(-da-0.5*(V*h))*1/h^2;
    A(i,i) = (2*da)*1/h^2;
    A(i,i+1)=(-da + 0.5*(V*h))*1/h^2;
    b(i,1)= (da/h^2 +V/(2*h))*uI;
  end
% Entradas penúltimas de la matriz y vector total
  A(E-2,E-3)=(-da-0.5*(V*h))*1/h^2;
  A(E-2,E-2) = (2*da)*1/h^2;
  b(E-2,1)= (da/h^2-V/(2*h))*uF;
% Matriz inversa
  C=inv(A);
% Valores de u´s interiores
  u=C*b;
% U totales
  U2=[0;u;1];
% Partición del intervalo [0,L]
  x2=zeros([E,1]);
  for r=1:E,
    x2(r,1)=(r-1)*h;
  end
clear A ;
```

```
clear C ;
clear b ;
clear u ;
clear E ;
clear h ;
```

```
E=81                    % Número de nodos
n =E-1                  % Número de elementos
h=L/n                   % Tamaño del elemento ( partición uniforme)
Pe=(V/(2*D))*h          % Número de Péclet
```

% CÁLCULO DE LAS ENTRADAS DE LA MATRIZ A Y EL VECTOR b CON EL MÉTODO UPWIN PARA UNA PARTICIÓN DE 80 ELEMENTOS

```
A=zeros(E-2);
b=zeros([E-2,1]);
A(1,1) = (2*da)*1/h^2;
A(1,2)=(-da + 0.5*(V*h))*1/h^2;
for i=2:E-3,
  A(i,i-1)=(-da-0.5*(V*h))*1/h^2;
  A(i,i) = (2*da)*1/h^2;
  A(i,i+1)=(-da + 0.5*(V*h))*1/h^2;
  b(i,1)= (da/h^2 +V/(2*h))*uI;
end
% Entradas penúltimas de la matriz y vector total
  A(E-2,E-3)=(-da-0.5*(V*h))*1/h^2;
  A(E-2,E-2) = (2*da)*1/h^2;
  b(E-2,1)= (da/h^2-V/(2*h))*uF;
% Matriz inversa
  C=inv(A);
```

```
% Valores de u´s interiores
  u=C*b;
% U totales
  U3=[0;u;1];
% Partición del intervalo [0,L]
  x3=zeros([E,1]);
  for r=1:E,
    x3(r,1)=(r-1)*h;
  end
```

```
% Cálculo de U1 interpolado
  U11=zeros(E,1);
  for j=1:E,
    for i=1:21,
      if x3(j,1) >= x1(i,1) & x3(j,1)<= x1(i+1,1)
      U11(j,1)=((x3(j,1)-x1(i+1,1))/(x1(i,1)-x1(i+1,1)))*U1(i,1) +
               ((x3(j,1)-x1(i,1))/(x1(i+1,1)-x1(i,1)))*U1(i+1,1) ;
      break;
      end
    end
  end
```

```
% Cálculo de U22 interpolado
  U22=zeros(E,1);
  for j=1:E,
    for i=1:21,
      if x3(j,1) >= x2(i,1) & x3(j,1)<= x2(i+1,1)
      U22(j,1)=((x3(j,1)-x2(i+1,1))/(x2(i,1)-x2(i+1,1)))*U2(i,1) +
               ((x3(j,1)-x2(i,1))/(x2(i+1,1)-x2(i,1)))*U2(i+1,1) ;
break;
```

```
    end
  end
end
```

```
% Solución exacta
  Y=(exp((V/D)*x3) -1)/(exp(V/D)-1);
% Gráfica (eliminación de las oscilaciones, pero perdidad de exactitud)
  plot(x3,Y,'r',x3,U11,'-',x3,U22,'-.',x3,U3,'.-');
```

La gráfica comparativa de las soluciones es la siguiente

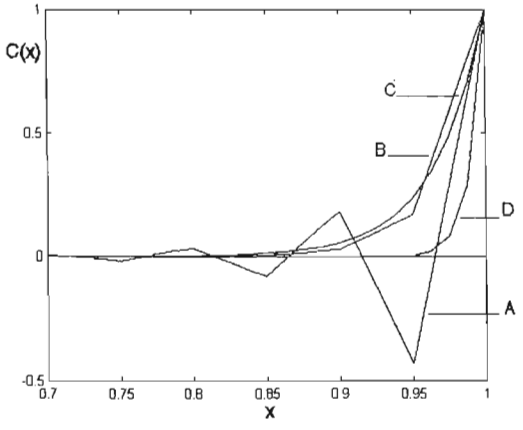

Figura 10: Solución en diferencias finitas de la ecuación (4.12), (con D=1/100, v=1). Usando diferencia finita centrada y $\mathbb{P}_c = 2.5$, línea (A); considerando la difusión artificial, líneas (B) y (C), $\mathbb{P}_e = 2.5$ y 0.625, respectivamente. Se consideraron particiones de tamaño h =0.05, para las soluciones (A) y (B); $h = 0.0125$ para (C). Nótese el efecto de eliminación de oscilaciones para $\mathbb{P}_e$ grande en la difusión artificial. Línea (D) denota la solución exacta.

9.3. Programa 3

En este programa se muestra que la técnica de la combinación de diferencias finitas centradas para la primera derivada y utilizando el esquema Scharfetter-Gummel (SG), la solución numérica es más precisa en comparación con el Método *upwind*.

Consideremos la ecuación

$$-D_{\lambda h}c''(x) + \mathrm{v}c'(x) = 0$$

con condiciones de frontera $c(0) = 0$ y $c(L) = 1$.

Con el programa 3 se obtiene la solución la cual es nodalmente exacta y es una mejor aproximación a la solución analítica del problema. En este programa se hace una comparación entre los métodos *upwind* y Scharfetter-Gummel, para ello se hace una discretización del dominio en 80 elementos. Los valores de los términos advectivo y difusivo son v= 1 y $D = \frac{1}{200}$.

Programa.

```
% DATOS INICIALES
L=1                    % Longitud del intervalo
E=81                   % Número de Nodos
n =E-1                 % Número de elementos
h=L/n                  % Tamaño del elemento ( partición uniforme)
D=1/200                % Término Difusivo
V=1                    % Término Advectivo
uI=0                   % Valor en la frontera inicial
uF=1                   % Valor de u en la frontera final
Pe=(V/(2*D))*h         % Número de Péclet
da=D*(1+Pe)            % Difusión Artificial
SG=D*(1+Pe-1+(2*Pe)/(exp(2*Pe)-(1))) % esquema Scharfetter-Gummel
% CÁLCULO DE LA MATRIZ A Y EL VECTOR b PARA EL ESQUEMA UPWIND
A=zeros(E-2);
```


ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA

```
b=zeros([E-2,1]);
A(1,1) = (2*da)*1/h^2;
A(1,2)=(-da + 0.5*(V*h))*1/h^2;
for i=2:E-3,
  A(i,i-1)=(-da-0.5*(V*h))*1/h^2;
  A(i,i) = (2*da)*1/h^2;
  A(i,i+1)=(-da + 0.5*(V*h))*1/h^2;
  b(i,1)= (1/h^2 +V/(2*h))*uI;
end
% Entradas penúltimas de la matriz y vector b
A(E-2,E-3)=(-da-0.5*(V*h))*1/h^2;
A(E-2,E-2) = (2*da)*1/h^2;
b(E-2,1)= (da/h^2-V/(2*h))*uF;
% Matriz inversa
C=inv(A);
% Valores de u´s interiores
u=C*b;
% U totales
U1=[0;u;1];
clear A;
clear C:
clear b;
```

% CÁLCULO DE LA MATRIZ A Y EL VECTOR b PARA EL ESQUEMA SCHARFETTER-GUMMEL

```
A=zeros(E-2);
b=zeros([E-2,1]);
A(1,1) = (2*SG)*1/h^2;
A(1,2)=(-SG + 0.5*(V*h))*1/h^2;
for i=2:E-3,
  A(i,i-1)=(-SG-0.5*(V*h))*1/h^2;
```

```
    A(i,i) = (2*SG)*1/h^2;
    A(i,i+1)=(-SG + 0.5*(V*h))*1/h^2;
    b(i,1)= (1/h^2 +V/(2*h))*uI;
end
% Entradas penúltimas de la matriz y vector b
  A(E-2,E-3)=(-SG-0.5*(V*h))*1/h^2;
  A(E-2,E-2) = (2*SG)*1/h^2;
  b(E-2,1)= (SG/h^2-V/(2*h))*uF;
% Matriz inversa
  C=inv(A);
% Valores de u´s interiores
  u=C*b;
% V totales
  U2=[0;u;1];
% Partición
  x=zeros([E,1]);
  for r=1:E,
    x(r,1)=(r-1)*h;
  end
```

```
% Solución exacta
  Y=(exp((V/D)*x) -1)/(exp(V/D)-1);
```

% Gráficas (solución exacta y para los esquemas *upwind* y Scharfetter-Gummel)

```
  plot(x,Y,'-',x,U1,'r',x,U2,'+').
```

La gráfica de las soluciones viene dada en la siguiente pag.

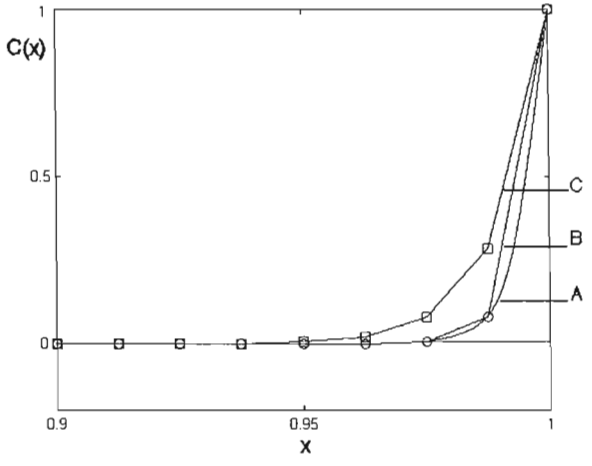

Figura 11: Comparación de la solución numérica del problema de Advección-Difusión con ($D = \frac{1}{200}$), línea C solución utilizando la difusión artificial (*upwind*), línea B solución considerando la difusión óptima (SG), y línea A es la solución analítica. Se utlizó el caso de $\mathbb{P}_e = 1.25$.

10. Apéndice B

En el presente apéndice se muestran resultados que se usan en la demostración realizada en el capítulo 7 para la demostración de convergencia de la solución numérica utilizando la técnica hallada con diferencias finitas en el método de elemento finito. Estos resultados se enuncian sin demostración, los cuales pueden consultarse en [7].

- **Desigualdad de Young**

$$ab \leq \varepsilon a^2 + \frac{1}{4\varepsilon} b^2, \qquad \forall\, a, b \in \mathbb{R}, \forall \varepsilon > 0. \tag{8.1}$$

- **Espacios $L^p(a,b)$**

$$L^p(a,b) = \left\{ f : (a,b) \to \mathbb{R}, \int_a^b |f(x)|^p \, dx < \infty \right\} \tag{8.2}$$

- **La norma en los espacios $L^2(a,b)$**

$$||f(x)||_2 = \left(\int_a^b |f(x)|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \tag{8.3}$$

  aquí se consideró el caso particular $p = 2$.

- **Desigualdad de Poincaré**

  Para cada intervalo $[a,b]$, existe una constante $C_p > 0$ tal que

$$||\phi||_{L^2(a,b)} \leq C_p \left|\left|\phi^{(1)}\right|\right|_{L^2(a,b)} \tag{8.4}$$

  para todo $\phi \in C^1([a,b])$ tal que $\phi(a) = \phi(b) = 0$.y donde $\left|\left|\phi^{(1)}\right|\right|_{L^2(a,b)}$ es la norma $L^2(a,b)$.

- **Desigualdad de Cauchy-Schwars**

  Sean $f(x)$ y $g(x)$ dos funciones definidas en el intervalo $[a,b]$, entonces la siguiente desigualdad se cumple si f y $g \in L^2(a,b)$

$$\left| \int_a^b f(x) g(x) dx \right| \leq \left(\int_a^b f^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_a^b g^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}} \tag{8.5}$$

- Teorema

  Sea $0 \leq m \leq k+1$, *con* $k \geq 1$ *y asumimos que* $f^{(m)} \in L^2(a,b)$ *para* $0 \leq m \leq k+1$; *entonces existe una constante positiva* C, *independiente de* h, *tal que*

$$\left|\left|\left(f - \Pi_h^k f\right)^{(m)}\right|\right|_{L^2(a,b)} \leq Ch^{k+1-m} \left|\left|f^{(k+1)}\right|\right|_{L^2(a,b)} \qquad (8.6)$$

- Corolario

  Para cualquier función continua f en $[a,b]$, *el polinomio de interpolación por partes* $\Pi_h^k f$ *coincide sobre cada elemento de la partición* I_j, *con el polinomio de interpolación de* f *dado* I_j, *en los* $n+1$ *nodos.*

11. Bibliografía

Referencias

[1] Celia, M. A., Russell.T.F., Herrera, I. y Ewing, R. E. *An Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for the Advection-Diffusion Equation.* Advances in Water Resources , 13(4), pp 187-206, 1990.

[2] Dimitri Vvedensky *Partial Differential Equations With Mathematica* Addison-Wesley Publishing Company. 1993

[3] H.-G.Roos, M.Stynes, L. Tobiska, "*Numerical Method for Singularly perturbed Differential Equations. Convection-Diffusion and flow problems*". Springer-Verlag, Berlin (1996).

[4] Herrera, I., Ewing, R.E., Celia M.A. y Russell,T. "*Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method: The Theoretical Framework*". Numerical Methods for partial Differential Equations 9(4), pp. 431-457, 1993

[5] Herrera, I. *Modelación Matemática de sistemas terrestres* (Notas de curso en preparación) Instituto de Geofísica, (UNAM).

[6] Myron B. Allen III, Ismael Herrera & George F. Pinder *Numerical Modeling in Science And Engineering;* John Wiley & Sons, Inc . 1988.

[7] Quarteroni, Sacco & Saleri ; *Numerical mathematics* ; Springer Verlag, New York c 2000.

[8] Richard E. Ewing, Hong Wang *A summary of Numerical Methods for time-dependent Advection-Dominated Partial Differential Equations.* Journal of Computational and Applied Mathematics 128, pp 423-445, Elsevier Science Publisher B.V. (North-Holland). 2001.

[9] Scharfetter D. & Gummel H. *Large-Signal Analysis of a Silicon Read Diode Oscillator,* IEEE Transaction on Electron Devices, Vol. Ed.-16, No.1, January 1969.

[10] Thomas J. R. HUGHES and Michel MALLET *A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics:III. The Generalized Streamline Operator for multidimensional Advective-Diffusive Systems.* Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 58, pp 305-328, Elsevier Science Publisher B.V. (North-Holland). 1986.

[11] Xavier Oliver Olivella, Carlos Agelet de Sacribar *Mécanica de Medios Continuos para Ingenieros.* Ediciones UPC, 2000.

[12] Kolumban Hutter & Klaus Jöhnk *Continuum Methods of physical Modeling.* Springer-Verlag Berlin Heidelber New York 2004